

✓ 307.226

10

18  
1970

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

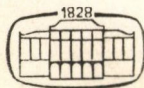
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XVIII. KÖTET

1. FÜZET



AKADEMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1970



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21., pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egy számlaszám: 43 790 057 181 útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# DISZLOKÁCIÓK

## KONTINUUM ELMÉLETE IV.\*

### DISZLOKÁCIÓK ÉS TÉRFOGATI HIBÁK KÖLCSÖNHATÁSA

KOVÁCS ISTVÁN  
ELTE, Kísérleti Fizikai Tanszék

#### 1. Bevezetés

Cikksorozatunk előző részeiben (I., II., III.) [1] áttekintést adtunk a diszlokációk alaptulajdonságairól (I), a rugalmas kontinuum alapegyenleteiről (II) és az egyedi diszlokációk kvantitatív tulajdonságainak leírásáról (III). Jelen dolgozatban a diszlokációk és térfogati hibák kölcsönhatását tárgyaljuk.

A szilárd testek tulajdonságait alapvetően befolyásolják az ún. térfogati hibák. A térfogati hibák lehetnek „pontszerűek”, azaz gyakorlatilag egy atomtérfogat kiterjedésűek (üres rácshely vagy vakancia, intersticiális atom, szennyező atom), vagy igen nagyok, a mátrixba beágyazott idegen fázisok (kiválások ötvözetekben, martenzites átalakulások magjai stb.) formájában. A térfogati hibák jelenléte rugalmas feszültségek fellépését eredményezi és így más feszültségterekkel, tehát diszlokációkkal is, kölcsönhatás alakul ki.

Ez a kölcsönhatás jelentős változást okoz elsősorban az anyag képlékeny viselkedésében, mert a térfogati hibák a diszlokációk mozgását lényegesen akadályozzák. Ezt először Cottrell [2] és Nabarro [3] ismerte fel a széntartalmú acélok folyáshatárának vizsgálata során. Arra a következtetésre jutottak, hogy a szénatomok és a diszlokációk kölcsönhatása miatt a diszlokációk körül a szénatomokban feldúsult tartomány (Cottrell felhő) alakul ki. Ezért, legalábbis az alakváltozás kezdetén, a diszlokáció elmozgatása a felhő elmozdítását is megköveteli, így a mozgatáshoz szükséges feszültség, azaz a folyáshatár jelentősen megnövekszik a tiszta anyaghoz képest.

A kölcsönhatás természetére vonatkozóan Cottrell és Nabarro rugalmas hatást tételezett fel, amely a mátrix és az oldott atomok méretkülönbségéből származik. Az ilyen típusú kölcsönhatásokat matematikailag először Cottrell és Bilby [4], majd Bilby [5] vizsgálta.

Az oldott atomok vagy általában az idegen fázisok hatása azonban nemcsak a méret különbségéből származik. Az oldott atom vagy idegen fázis rugalmas tulajdonságai is különböznek általában a mátrixétól, ezért várható, hogy még a méret effektus hiányában is, ezek hatása jelentkezik. Valóban, ez az ún. modulusz effektus összemérhető a méretkülönbség hatásával [6].

Kölcsönhatás származik még a diszlokáció körül kialakuló elektrosztatikus tér [7], a parciális diszlokációkhoz tartozó rétegződési hiba [8], a lokális rend [9] stb. hatásából is. Ezen járulékok nagysága azonban lényegesen kisebb, mint a rugalmas hatásoké.

\* Érkezett 1968. okt. 24.



Jelen dolgozat célja a térfogati hibák rugalmas tulajdonságainak egységes leírása. Ezt a térfogati hibák kontinuum modelljével végezzük el, amelynek alapjait *Eshelby* dolgozta ki [10]. A kapott eredményeket alkalmazzuk az oldott atomok és diszlokációk közötti kölcsönhatás meghatározására néhány fontosabb speciális esetben.

## 2. A térfogati hibák rugalmas tulajdonságai

A bevezetésben említettek alapján a térfogati hibákat rugalmas hatásuk szempontjából két csoportba sorolhatjuk. Az egyikbe tartoznak azok, amelyek rugalmas állandói megegyeznek a mátrixéval. Ezek hatása a méret különbségéből származik. Az ilyen típusú hibákat homogén térfogati hibáknak nevezzük. A másik csoportba tartoznak a mátrixétől különböző rugalmas állandójú, de a mátrixba pontosan, méretkülönbség nélkül illeszkedő hibák. Ezeket térfogati inhomogenitásoknak nevezzük. E két tulajdonság általában egyidejűleg hozzátartozik az adott térfogati hibához, azonban külön-külön tárgyalhatók, mert egyidejű tárgyalásuk csak másodrendű korrekciót eredményez [6].

### 2.1. Homogén térfogati hiba

A homogén térfogati hiba kontinuum modelljét a következőképpen adhatjuk meg. Legyen adott egy feszültségmentes, homogén és izotróp közeg (mátrix), valamint a mátrix anyagával megegyező anyagú test, aminek a felülete  $S'$  és szintén feszültségmentes. Emeljük ki gondolatban a mátrix egy zárt  $S$  felülettel határolt részét és kényszerítsük az így keletkezett üregbe az eredetileg  $S'$  felületű testet. Ebben az esetben homogén térfogati hibát kapunk. A bekényszerített test megbontja az eredeti feszültségmentes egyensúlyt (pl. azért, hogy a bekényszerített test térfogata nagyobb, mint az üregé volt), azaz rugalmas elmozdulások jönnek létre a mátrixban és a hibában egyaránt.

Az elmozdulások egyértelműen jellemezhetők a mátrixban valamely folytonos  $u_i^C(\vec{r})$  függvénnyel, amely megadja az  $\vec{r}$  helyvektorú pont elmozdulását a feszültségmentes egyensúlyi helyzethez képest. A térfogati hibában azonban bonyolultabb a helyzet. Itt egy kiszemelt pont elmozdulásvektora két tagból tevődik össze. Az egyik ( $u_i^T$ ) megadja azokat az elmozdulásokat, amelyek az  $S'$  felületű testnek az üreg méretére való deformációjakor lépnek fel, míg a másik tag azt a deformációt jellemzi, amely a mátrixéval egyidejűleg alakul ki és a feszültséges egyensúlyhoz vezet. Az így kapott eredő elmozdulásvektor megadja a test végső alakjának eltérését az eredeti (feszültségmentes) állapothoz képest, de az  $S$  felület mentén nem kapcsolódik folytonosan az  $u_i^C$  vektorhoz. Világos azonban, hogy a feszültségrelaxációt, tehát a feszültséges egyensúly beállítását jellemző második tag folytonosan megy át az  $S$  felületen a mátrixbeli  $u_i^C$  elmozdulásvektorba.

A rugalmas, izotróp kontinuumban kialakuló  $u_i^C$  elmozdulásokat *Eshelby* nyomán [10] a következőképpen határozhatjuk meg.

Végtelen kiterjedésű, feszültségmentes mátrixban határoljunk el gondolatban egy zárt  $S$  felületen belüli térrészt. Legyen adva továbbá egy test, amelynek anyaga megegyezik a mátrixéval és amelynek alakját az  $S$  felületű rész alakjával az  $\varepsilon_{ij}^T$  homogén transzformáció kapcsolja össze.  $\varepsilon_{ij}^T$ -t feszültségmentes transzformációnak nevezzük és ismertnek tételezzük fel. Kényszerítsük a testet az  $S$  felülettel határolt



rész helyébe. Ezt megtehetjük, ha a kérdéses rész eltávolítása után a test alakját rugalmas deformációkkal a  $-\varepsilon_{ij}^T$  transzformációnak megfelelően megváltoztatjuk. Ennek elérésére  $-\sigma_{ij}^T n_j$  erőrendszert ( $n_j$  a felület normális egységvektora) kell alkalmaznunk az  $S$  felület mentén, ahol (II. (14))

$$\sigma_{ij}^T = 2\mu\varepsilon_{ij}^T + \lambda\varepsilon^T\delta_{ij}, \quad (\varepsilon^T = \varepsilon_{jj}^T). \quad (1)$$

Forrasszuk ezután össze az anyagot az  $S$  felület mentén, ahol a két anyagrész most pontosan illeszkedik egymáshoz. Ha ezek után a rendszert magára hagyjuk, azaz megszüntetjük a  $-\sigma_{ij}^T n_j$  erőrendszert, akkor az  $S$  felület mentén

$$dF_i = \sigma_{ij}^T \cdot n_j dS \quad (2)$$

erő jelenik meg. Ennek hatására a hibában és a mátrixban olyan  $u_i^C$  elmozdulások alakulnak ki, amelyekből származó rugalmas feszültségtér a (2) alatti erőt megszünteti. Ezt röviden úgy fejezzük ki, hogy az  $S$  felület mentén ható erők relaxálnak. Az  $u_i^C$  elmozdulások a következőképpen számíthatók ki.

Valamely  $dF_i$  ponterő által létrehozott elmozdulás II. (45) alapján

$$du_i = U_{ij} dF_j, \quad (3)$$

ahol

$$U_{ij} = \frac{1}{4\pi\mu} \left( \frac{1}{2} \nabla^2 \delta_{ij} - \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right) |\vec{r} - \vec{r}'|$$

a Green függvény tenzor,  $\nu$  a Poisson szám. Ezzel

$$u_i^C = \int_S \sigma_{jk}^T U_{ij} (|\vec{r} - \vec{r}'|) dS_k,$$

vagy beírva (1)-et és alkalmazva Gauss tételét

$$u_i^C = \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \varepsilon_{jk}^T \cdot \psi_{,ijk} - \frac{1}{2\pi} \varepsilon_{ik}^T \varphi_{,k} - \frac{\nu}{4\pi(1-\nu)} \varepsilon^T \varphi_{,i}, \quad (4)$$

ahol

$$\varphi(\vec{r}) = \int_V \frac{dV'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad \psi(\vec{r}) = \int_V |\vec{r} - \vec{r}'| dV'.$$

Itt  $V$  a hiba, illetve a mátrix térfogata aszerint, hogy az elmozdulásokat a hibában vagy a mátrixban akarjuk kiszámítani.

A relaxáció során kialakuló deformáció a mátrixban és a hibában (4) felhasználásával

$$\varepsilon_{ij}^C = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}).$$

A mátrixban kialakuló feszültség

$$\sigma_{ij}^C = 2\mu\varepsilon_{ij}^C + \lambda\varepsilon^C\delta_{ij}. \quad (5)$$

A hibában a relaxáció előtt már volt  $-\sigma_{ij}^T$  feszültség, ezért a relaxáció utáni állapotban az eredő feszültség

$$\sigma_{ij}^H = \sigma_{ij}^C - \sigma_{ij}^T = 2\mu(\varepsilon_{ij}^C - \varepsilon_{ij}^T) + \lambda(\varepsilon^C - \varepsilon^T)\delta_{ij}. \quad (6)$$



A kialakuló deformáció- és feszültségtér tehát csak a hiba feszültségmentes transzformációjától függ. A kapott kifejezések explicit kiszámítása általános esetben igen bonyolult és viszonylag egyszerű formában csak gömb vagy ellipszoid alakú hibára végezhető el [10].

A legegyszerűbb esetben a feszültségmentes transzformáció tiszta térfogati dilatáció, azaz

$$\varepsilon_{ij}^T = \frac{1}{3} \varepsilon^T \cdot \delta_{ij}.$$

Ekkor

$$u_i^C = -\frac{1+\nu}{12\pi(1-\nu)} \varepsilon^T \cdot \varphi_{,i}; \quad \varepsilon_{ij}^C = -\frac{1+\nu}{12\pi(1-\nu)} \varepsilon^T \cdot \varphi_{,ij}.$$

A relaxáció során fellépő térfogati dilatáció a hibában

$$\varepsilon^C = \varepsilon_{jj}^C = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)} \varepsilon^T, \quad (7)$$

mert ekkor

$$\varphi_{,jj} = -4\pi.$$

Utóbbi összefüggéseink nyilvánvalóan alkalmazhatók gömb alakú hibákra. Ez az eset gyakorlati szempontból igen fontos, mert az oldott idegen atomok mérethatása köbös kristályokban jó közelítéssel gömbszimmetrikusnak tekinthető. Ezért a (7) kifejezés alapvető fontosságú, mert összefüggést ad meg a mérhető  $\varepsilon^C$  térfogatváltozás és az  $\varepsilon^T$  feszültségmentes transzformáció között.

Az eddigiekben végtelen mátrixot tételeztünk fel. A valóságban azonban a mátrix nem végtelen, hanem a végesben fekvő  $S_0$  felülettel határolt test. Az  $S_0$  felület mentén pedig megadott határfeltételeknek kell teljesüniük. A végtelen mátrixra érvényes  $u_i^C$  elmozdulások, illetve  $\sigma_{ij}^C$  feszültségek azonban általában nem elégítik ki az  $S_0$ -on előírt határfeltételeket.

Az  $S_0$  felületű véges test modellje a következőképpen adható meg. Jelöljük ki a végtelen mátrixban a testnek megfelelő  $S_0$  felületet. Hozzunk létre ekkor a mátrixban olyan  $u_i^K$  elmozdulásokat, illetve  $\sigma_{ij}^K$  feszültségeket, amelyeknek nincs szingularitásuk az  $S_0$  felületen belüli térben, de amelyekkel beálló eredő elmozdulás, illetve feszültségtér az előírt határfeltételt már teljesíti. A határfeltétel a legtöbb esetben kétféle lehet. Vagy azt követeljük meg, hogy valamilyen külső kényszer hatása miatt a test határfelülete ne mozduljon el, vagy éppen a külső kényszer hiánya miatt a test határfelülete feszültségmentes legyen. Az első esetben az  $u_i^K$  elmozdulásokat kell úgy megválasztanunk, hogy az eredő elmozdulásokra teljesüljön a következő egyenlőség,

$$(u_i^C + u_i^K)|_{S_0} = u_i^M|_{S_0} = 0. \quad (8)$$

A második esetben a  $\sigma_{ij}^K$  feszültségeket kell úgy megválasztanunk, hogy a test felülete mentén

$$(\sigma_{ij}^C + \sigma_{ij}^K)n_j|_{S_0} = \sigma_{ij}^M n_j|_{S_0} = 0 \quad (9)$$

legyen ahol

$$\sigma_{ij}^K = 2\mu e_{ij}^K + \lambda e^K \delta_{ij}. \quad (10)$$

Az  $u_i^K$ , illetve  $\sigma_{ij}^K$  mennyiségeket képelmozdulásoknak, illetve képfeszültségeknek nevezzük. Ezek figyelembevételével az eredő feszültség a mátrixban és a hibában

$$\sigma_{ij}^M = \sigma_{ij}^C + \sigma_{ij}^K, \quad (11)$$

$$\sigma_{ij}^H = \sigma_{ij}^M - \sigma_{ij}^T. \quad (12)$$

### 2.1.1. Homogén térfogati hiba sajátenergiája

A térfogati hibát tartalmazó test energiája különbözik a hibátlan mátrix energiájától. A különbséget, a hiba kialakításához szükséges munkát, a hiba sajátenergiájának nevezzük.

Az előbbi gondolatmenet alapján a sajátenergia két részből tevődik össze. Az egyik rész azzal a munkával egyenlő, amit a hibát képező test  $-\varepsilon_{ij}^T$  deformációjához kell befektetnünk. Ennek nagysága (a hiba térfogatát  $V_h$ -val jelölve)

$$E_1 = \frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^T \varepsilon_{ij}^T dV. \quad (13)$$

A második rész a feszültségrelaxációval kapcsolatos. Az egyensúlyi helyzet beállása során

$$E_2 = -\frac{1}{2} \int_S u_i^C dF_i = -\frac{1}{2} \int_S \sigma_{ij}^T u_i^C dS_j \quad (14)$$

munkát végzünk. Felhasználva a  $\sigma_{ik,k} = 0$  egyensúlyi feltételt (II. (12)), a Gauss tétel alkalmazásával (14)-re a következő kifejezést kapjuk

$$E_2 = -\frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^T \varepsilon_{ij}^C dV. \quad (15)$$

A végtelen mátrixban levő térfogati hiba sajátenergiája tehát

$$E_\infty^S = E_1 + E_2 = \frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^T (\varepsilon_{ij}^T - \varepsilon_{ij}^C) dV. \quad (16)$$

Figyelembe véve a

$$\sigma_{ij}^T \varepsilon_{ij}^C = \sigma_{ij}^C \varepsilon_{ij}^T \quad (17)$$

azonosságot és a (6) összefüggést felhasználva

$$E_\infty^S = -\frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^H \varepsilon_{ij}^T dV. \quad (18)$$

Ebből a gömb alakú térfogati hiba sajátenergiája

$$E_\infty = \frac{2}{9} \mu V_h \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot (\varepsilon^T)^2.$$



Véges test esetén a feszültségrelaxáció során végzett munka (14) helyett

$$E'_2 = -\frac{1}{2} \int_S u_i^M dF_i = -\frac{1}{2} \int_S u_i^C dF_i - \frac{1}{2} \int_S u_i^K dF_i,$$

azaz a teljes energia ekkor

$$E^S = E_\infty^S + E^K, \quad (19)$$

ahol

$$E^K = -\frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^K \varepsilon_{ij}^T dV.$$

### 2.1.2. Homogén térfogati hiba kölcsönhatása más feszültségtérrel

Ha a térfogati hibát tartalmazó testben valamely  $\sigma_{ij}^A$  feszültség hatására  $\varepsilon_{ij}^A$  deformáció jön létre, akkor a test rugalmas energiája

$$E_{\text{rug}} = E_A + E^S + E_k$$

ahol

$$E_A = \frac{1}{2} \int_{V_{\text{test}}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A dV.$$

A térfogati hiba és a  $\sigma_{ij}^A$  feszültségtér együttes hatásából származó  $E_k$  tagot kölcsönhatási energiának nevezzük. Ez azzal a munkával egyenlő, amennyivel több munkavégzés kell a már deformált mátrixban a hiba létrehozásához, mint a deformálatlanban. Ugyanis a relaxáció, illetve a képelmozdulások során a  $\sigma_{ij}^A$  feszültségek ellen is munkát kell végeznünk. Ha ez a munka negatív, más szóval a  $\sigma_{ij}^A$  feszültségtér munkája pozitív, azaz a hiba kialakítását elősegíti, akkor a kölcsönhatási energia negatív és fordítva. A kölcsönhatási energia értékét tetszőleges  $A$  és  $B$  feszültségterekre vonatkozóan a következő kifejezés adja meg (II. (31)),

$$E'_k = \frac{1}{2} \int_{V_{\text{test}}} (\sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^B + \sigma_{ij}^B \varepsilon_{ij}^A) dV = \int_{V_{\text{test}}} \sigma_{ij}^B \varepsilon_{ij}^A dV, \quad (20)$$

ahol felhasználtuk a (17) azonosságot. Kifejezésünk most úgy értelmezhető, mint az a munka, amelyet az  $\varepsilon_{ij}^A$  deformációk kialakítása során a már jelenlevő  $\sigma_{ij}^B$  feszültségek ellenében végzünk.

Alkalmazzuk a (20) kifejezést a térfogati hiba esetére. Ekkor figyelembe kell vennünk, hogy a hiba térfogatában és a mátrixban különböző (a hiba felületén egyensúlyt tartó) feszültségek vannak jelen. Bontsuk ezért az integrálási tartományt két részre,

$$E'_k = \int_{V_m} \sigma_{ij}^B \varepsilon_{ij}^A dV + \int_{V_h} \sigma_{ij}^B \varepsilon_{ij}^A dV.$$

A (11), (12) összefüggés szerint  $\sigma_{ij}^B = \sigma_{ij}^M$  a mátrixban ( $V_m$ ) és  $\sigma_{ij}^B = \sigma_{ij}^H$  a hibában. Ezt és a (17) azonosságot felhasználva

$$E'_k = \int_{V_m} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^M dV + \int_{V_h} \sigma_{ij}^H \varepsilon_{ij}^A dV. \quad (21)$$

Két esetet kell megkülönböztetnünk aszerint, hogy  $\sigma_{ij}^A$  külső vagy belső (szinguláris) feszültségforrásból származik-e. Tegyük fel először, hogy  $\sigma_{ij}^A$  a test felülete mentén ható külső erőktől ered. Ekkor a kölcsönhatási energia meghatározása a következő megfontolást igényli. Világos, hogy ha a testet és a külső erőket egyetlen rendszernek tekintjük, akkor kölcsönhatási energiáról nincs értelme beszélni, mert ekkor a test rugalmas energiájának növekedése egyenlő a külső erők helyzeti energiájának csökkenésével. Ezért ilyen esetben a kölcsönhatási energiát csak a test rugalmas energiájának megváltozása definiálja. A külső erők helyzeti energiájának megváltozása, a test külső  $S_0$  felületén kialakuló  $u_i^M$  elmozdulások során végzett munkájukkal egyenlő, azaz

$$E_h = \int_{S_0} \sigma_{ij}^A u_i^M dS_j.$$

A (20) kifejezés ezt a munkát is magában foglalja, ezért a kölcsönhatási energia most

$$E_k = E'_k - E_h = -E_h. \quad (22)$$

$u_i^M$  mindenütt folytonos és egyértékű a mátrixban, ezért a Gauss tétellel

$$\int_{V_m} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^M dV = \int_{S_0} \sigma_{ij}^A u_i^M dS_j + \int_S \sigma_{ij}^A u_i^M dS'_j,$$

ahol  $S_0$  a mátrix külső,  $S$  a mátrix felülete a hiba mentén,  $dS'_j$  ennek felületelem vektora. A második tag a hiba felületére (felületelem vektora  $dS''_j$ ) vett integrállá írható át ( $dS'_j = -dS''_j$ ), mert  $u_i^M$  folytonos  $S$ -nél, tehát a Gauss tétellel

$$\int_S \sigma_{ij}^A u_i^M dS'_j = - \int_S \sigma_{ij}^A u_i^M dS''_j = - \int_{V_h} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^M dV = - \int_{V_h} \sigma_{ij}^M \varepsilon_{ij}^A dV.$$

Ezt (22)-be helyettesítve és felhasználva, hogy  $E'_k = 0$  és  $\sigma_{ij}^H = \sigma_{ij}^M - \sigma_{ij}^T$ , a kölcsönhatási energia (17)-tel

$$E_k = - \int_{V_h} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^T dV. \quad (23)$$

Vizsgáljuk meg most azt az esetet, amikor  $\sigma_{ij}^A$  a mátrixban szinguláris belső forrásból (pl. diszlokációtól) származik és  $\sigma_{ij}^A$  teljesíti a (9) határfeltételt. Nyilvánvaló, hogy a (20) kifejezés most közvetlenül megadja a kölcsönhatási energiát, mert most csak a test rugalmas energiájának az  $E^S + E_A$  értékhez képesti megváltozását tartalmazza.

A (21) kifejezés első tagjában az integranduszra most is érvényes, hogy  $\sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^M = (\sigma_{ij}^A u_i^M)_{,j}$ , mert  $u_i^M$  a mátrixban folytonos és egyértékű, tehát a Gauss tétellel az előző esethez hasonlóan

$$\int_{V_m} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^M dV = \int_{S_0} \sigma_{ij}^A u_i^M dS_j + \int_S \sigma_{ij}^A u_i^M dS'_j = - \int_{V_h} \sigma_{ij}^M \varepsilon_{ij}^A dV,$$

mert az  $S_0$ -ra vett integrál a (9) határfeltétel miatt nulla. Ezt (21)-be helyettesítve ismét a (23) összefüggésre jutunk: (23) tehát egyaránt érvényes tetszőleges külső vagy



belső forrásból származó  $\sigma_{ij}^A$  feszültségekre. Eredményünk azt mutatja, hogy a hiba feszültségmentes transzformációjának ismerete elegendő általános esetben is a kölcsönhatási energia meghatározásához. Ha  $\sigma_{ij}^A$  a hiba térfogatában állandó, akkor a (23) kifejezés az

$$E_k = -V_h \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^T \quad (24)$$

alakra egyszerűsödik.

## 2.2. Inhomogén térfogati hiba

Ha a  $\lambda$  és  $\mu$  rugalmas állandójú mátrixban  $\lambda^* \neq \lambda$  és  $\mu^* \neq \mu$  rugalmas állandójú térfogati hiba van, akkor inhomogén térfogati hibáról beszélünk.

Jelöljük  $\varepsilon_{ij}^{T*}$ -gal azt a feszültségmentes transzformációt, amely az inhomogén térfogati hiba feszültségmentes alakját a mátrixbeli üreg feszültségmentes alakjára transzformálja. Ekkor a relaxáció során kialakuló feszültségek a következőképpen adhatók meg:

$$\sigma_{ij}^C = 2\mu \varepsilon_{ij}^C + \lambda \varepsilon^C \delta_{ij} \quad (25)$$

a mátrixban, míg a hibában

$$\sigma_{ij}^H = \sigma_{ij}^C - \sigma_{ij}^{T*} = 2\mu^*(\varepsilon_{ij}^C - \varepsilon_{ij}^{T*}) + \lambda^*(\varepsilon^C - \varepsilon^{T*})\delta_{ij}. \quad (26)$$

Ezen feszültségek meghatározása visszavezethető a homogén térfogati hiba esetére. Ehhez olyan ekvivalens térfogati hibát keresünk, amelyet ugyanabba az üregbe helyezve a kialakuló feszültségek és a deformációk a fentiekkel egyenlők.

Bármely homogén térfogati hiba megadásához a feszültségmentes transzformációját kell ismernünk. Az ekvivalens homogén hiba  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$  feszültségmentes transzformációját úgy határozhatjuk meg, hogy a (6) és (26) kifejezések egyenlőségéből kifejezzük  $\varepsilon_{ij}^C$ -t mint az ismertnek feltételezett  $\lambda^*$ ,  $\mu^*$ ,  $\varepsilon_{ij}^{T*}$ , továbbá az egyelőre még ismeretlen  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$  függvényét. A (4) összefüggés alapján azonban  $\varepsilon_{ij}^C$  kifejezhető a homogén hiba feszültségmentes transzformációjával, azaz  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ -vel. Az így kapott egyenletben már csak  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$  lesz ismeretlen. Pl. gömb alakú hiba esetén az ekvivalens térfogati hiba feszültségmentes transzformációjára a következő kifejezést kapjuk

$$\bar{\varepsilon}^T = \frac{\kappa^*}{\alpha(\kappa^* - \kappa) + \kappa} \varepsilon^{T*}; \quad \bar{\varepsilon}_{ij}^T = \frac{\mu^*}{\beta(\mu^* - \mu) + \mu} \varepsilon^{T*}, \quad (27)$$

ahol

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^T = \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \frac{1}{3} \bar{\varepsilon}^T \delta_{ij} \quad (28)$$

az  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$  tenzor deviatorikus komponense,

$$\kappa = \lambda + \frac{2}{3} \mu \quad (29)$$

a térfogati rugalmassági modulusz, továbbá

$$\alpha = \frac{1 + \nu}{3(1 - \nu)}; \quad \beta = \frac{2}{15} \frac{4 - 5\nu}{1 - \nu}. \quad (30)$$

Az inhomogén térfogati hiba sajátenergiája a 2.1.1. pontban követett gondolatmenet megismétlésével

$$E_{\infty}^* = -\frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^H \varepsilon_{ij}^{T*} dV.$$

A  $\sigma_{ij}^A$  feszültségtérrel való kölcsönhatási energia pedig (23) alapján

$$E_k = - \int_{V_h} \sigma_{ij}^A \bar{\varepsilon}_{ij}^T dV. \quad (31)$$

### 2. 3. Térfogati inhomogenitások

Ha a  $\lambda$  és  $\mu$  rugalmas állandójú testben olyan  $S$  zárt felületű tartomány van, amelynek rugalmas állandói,  $\lambda^*$  és  $\mu^*$  különböznek  $\lambda$  és  $\mu$ -tól, de a test térfogata pontosan megegyezik az üregével, akkor ezt a tartományt térfogati inhomogenitásnak nevezzük. Ha nincs külső feszültség a testen, akkor az egész test feszültségmentes lesz. Külső feszültség esetén azonban a hiba — a mátrixétől különböző rugalmas állandói miatt — ezzel a feszültségtérrel kölcsönhat.

Tegyük fel gondolatban, hogy homogén  $\sigma_{ij}^A$  deformációt hoztunk létre az inhomogenitást tartalmazó testben. Ekkor az inhomogenitást határoló  $S$  felület mentén

$$\sigma_{ij}^{A*} - \sigma_{ij}^A = 2(\mu^* - \mu) \varepsilon_{ij}^A + (\lambda^* - \lambda) \varepsilon^A \delta_{ij} \quad (32)$$

feszültség lép fel. Nyilvánvaló, hogy az  $\varepsilon_{ij}^A$  deformáció fenntartásához olyan segéderőket kell alkalmazni az előbbi felület mentén, amelyek az előbbi erőket kompenzálják. Ha ezeket a segéderőket megszüntetjük, akkor feszültség relaxáció lép fel, amely a mátrixban és az inhomogenitásban elmozdulásokat eredményez. A relaxáció után az  $S$  felületen ható erő nulla lesz, beáll az egyensúly. Az ennek megfelelő elmozdulások (3) alapján

$$u_i^C = [2(\mu - \mu^*) \varepsilon_{ij}^A + (\lambda - \lambda^*) \varepsilon^A \delta_{ij}] \int_S U_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') dS_j. \quad (33)$$

Az  $U_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$  Green függvény azonban most nem egyenlő  $U_{ij}(\vec{r} - \vec{r}')$ -vel, és általános felületre nem is lehet megadni [10]. Ezért a továbbiakban csak gömb alakú inhomogenitást vizsgálunk, úgy, hogy a feladatot ismét visszavezetjük a homogén térfogati hiba esetére.

Az ekvivalens térfogati hibát most a következőképpen kereshetjük meg. A feszültséges egyensúly beállása után az inhomogenitásban  $\varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^C$  eredő deformáció alakul ki. Ennek következményeként a hibában levő feszültség

$$\sigma_{ij}^{inh} = 2\mu^* (\varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^C) + \lambda^* (\varepsilon^A + \varepsilon^C) \delta_{ij} = \sigma_{ij}^{A*} + \sigma_{ij}^{C*}. \quad (34)$$

Egy homogén térfogati hiba akkor egyenértékű ezzel az inhomogenitással, ha a relaxáció során, az  $\varepsilon_{ij}^A$  deformáció jelenlétében, szintén  $\varepsilon_{ij}^C$  deformáció lép fel benne és az egyensúlyi feszültség  $\sigma_{ij}^H + \sigma_{ij}^A$  megegyezik az inhomogenitásban kialakuló



$\sigma_{ij}^{inh}$  feszültséggel. Ezért az ekvivalens homogén térfogati hiba  $\tilde{\varepsilon}_{ij}^T$  feszültségmentes transzformációját a következő kifejezés definiálja

$$\sigma_{ij}^H + \sigma_{ij}^A \equiv \sigma_{ij}^C - \tilde{\sigma}_{ij}^T + \sigma_{ij}^A = \sigma_{ij}^{inh},$$

azaz

$$\tilde{\sigma}_{ij}^T = 2\mu \tilde{\varepsilon}_{ij}^T + \lambda \tilde{\varepsilon}^T \delta_{ij} = 2(\mu - \mu^*)(\varepsilon_{ij}^C + \varepsilon_{ij}^A) + (\lambda - \lambda^*)(\varepsilon^C + \varepsilon^A) \delta_{ij}. \quad (35)$$

Ebből (7) felhasználásával a gömb alakú inhomogenitást helyettesítő homogén térfogati hiba feszültségmentes transzformációja

$$\tilde{\varepsilon}^T = -\frac{\kappa - \kappa^*}{\alpha(\kappa - \kappa^*) - \kappa} \varepsilon^A; \quad \tilde{\varepsilon}_{ij}^T = -\frac{\mu - \mu^*}{\beta(\mu - \mu^*) - \mu} \varepsilon_{ij}^A. \quad (36)$$

### 2.3.1. Energiaviszonyok térfogati inhomogenitás esetén

A térfogati inhomogenitás definíciójából következik, hogy sajátenergiája nincs, mert külső behatás nélkül feszültségmentesen illeszkedik a mátrixba. Az inhomogenitás hatása a test belső feszültségeire és így rugalmas energiájára csak más forrásból származó deformációk esetén jelenik meg. Ezért nyilvánvalóan csak kölcsönhatási energiáról beszélhetünk.

Vizsgáljuk meg először a végtelen mátrixot. Legyen ebben  $\varepsilon_{ij}^A$  deformáció. Az inhomogenitás jelenlétéből származó energiaváltozás két részből áll. Az egyik abból származik, hogy ugyanazon deformációk esetén a különböző rugalmas állandójú tartományokban a rugalmas energia különböző. Ez a járulék a következő

$$E_1 = \frac{1}{2} \int_{V_h} (\sigma_{ij}^{A*} - \sigma_{ij}^A) \varepsilon_{ij}^A dV. \quad (37)$$

A teljes energiaváltozáshoz hozzájárul még az a munka, amit a relaxáció során végzünk, amely (32) alapján

$$E_2 = \frac{1}{2} \int_S (\sigma_{ij}^{A*} - \sigma_{ij}^A) u_i^C dS_j'. \quad (38)$$

Az integrandusz folytonos a hiba térfogatában, ezért a Gauss-tétel alkalmazása után felhasználva a (17) azonosságot

$$E_2 = \frac{1}{2} \int_{V_h} (\sigma_{ij}^{C*} - \sigma_{ij}^C) \varepsilon_{ij}^A dV. \quad (39)$$

A (35) összefüggés szerint azonban

$$\sigma_{ij}^{C*} - \sigma_{ij}^C = \sigma_{ij}^A - \sigma_{ij}^{A*} - \tilde{\sigma}_{ij}^T.$$

Ezt a (39) összefüggésbe helyettesítve,  $E_2$  a következő lesz

$$E_2 = -\frac{1}{2} \int_{V_h} (\sigma_{ij}^{A*} - \sigma_{ij}^A) dV - \int_{V_h} \tilde{\sigma}_{ij}^T \varepsilon_{ij}^A dV.$$

A teljes energiaváltozás, azaz a kölcsönhatási energia tehát a következő

$$E_k = E_1 + E_2 = -\frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^A \tilde{\varepsilon}_{ij}^T dV, \quad (40)$$

ahol ismét felhasználtuk a (17) azonosságot.

A véges méretű mátrix tárgyalásához figyelembe kell vennünk, hogy ekkor a test rugalmas energiájának teljes megváltozása, tehát a kölcsönhatási energia, tartalmazza az  $u_i^M = u_i^C + u_i^K$  elmozdulások során, a  $\sigma_{ij}^A$  feszültség ellenében végzett munkát is. Ennek nagyságát a (22) alatti összefüggés adja meg. Előjelét azonban most pozitívnak kell vennünk, mert ha a  $\sigma_{ij}^A$  feszültségek munkája pozitív, akkor a test teljes rugalmas energiája nő. Ezért

$$E_3 = \int_{S_0} \sigma_{ij}^A u_i^M dS_j. \quad (41)$$

A képelmozdulásokon keresztül  $u_i^M$  a határfeltételnek a függvénye. Ha a külső deformációt valamilyen merev kényszer hozza létre, akkor az  $\varepsilon_{ij}^A$  deformáció kialakulása után a határfelület nem mozdulhat el, tehát a képelmozdulásoknak a (8) határfeltételt kell teljesíteniük. Ekkor a test teljes rugalmas energiája, s ezzel együtt a kölcsönhatási energia (40)-hez képest nem változik, mert a (41) energia ekkor nulla.

Ha azonban az  $\varepsilon_{ij}^A$  deformációt állandó külső feszültség hozza létre, akkor a (9) határfeltételnek kell teljesülnie. Ebben az esetben (41) ugyanúgy átalakítható, mint (22), tehát (23) felhasználásával

$$E_3 = \int_{V_h} \sigma_{ij}^A \tilde{\varepsilon}_{ij}^T dV. \quad (42)$$

$E_3$  ismeretében megadható a rugalmas energia teljes megváltozása, azaz a kölcsönhatási energia, a (9) határfeltétel esetére is

$$E_k = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{1}{2} \int_{V_h} \sigma_{ij}^A \tilde{\varepsilon}_{ij}^T dV. \quad (43)$$

A kölcsönhatási energia nagysága tehát most is ugyanaz, mint az előbbi esetekben, előjele azonban ellenkező. Ezt a tényt a legegyszerűbben az üreggel, mint inhomogenitással kapcsolatban érthetjük meg. Ha üreget tartalmazó testet adott mértékű deformációnak vetünk alá, a felhalmozódó rugalmas energia nyilvánvalóan kisebb, mint a tömör anyag esetén. Ha azonban állandó feszültséget alkalmazunk az üreges test felületén, akkor az üreg jelenléte miatt nagyobb deformációk alakulnak ki, mint a tömör anyagban, ezért a rugalmas energia nagyobb lesz. Így a (40), (43) összefüggéseink azt mutatják, hogy a kölcsönhatási energia nagysága mindkét határfeltétel esetén ugyanaz, de a kölcsönhatás az egyik esetben csökkenti, a másikban pedig növeli a test rugalmas energiáját.

Végül még egy, a rácshibák szempontjából alapvető esetet kell megvizsgálnunk. Ez olyan  $\varepsilon_{ij}^A$  deformációkra vonatkozik, amelyek nem külső feszültségektől, hanem belső forrásból (a térfogati hibától vagy inhomogenitástól független rácshibától) származnak. Ebben az esetben a  $\sigma_{ij}^A$  feszültségtér, valamint az inhomogenitástól származó feszültségtér egyetlen rendszerhez, a testhez tartozik. Nyilvánvaló, hogy



ekkor a rendszer energiaváltozásában az  $E_3$  tag fel sem lép, mert amennyivel nő a test energiája az  $\varepsilon_{ij}^M$  deformációk kialakulása során a  $\sigma_{ij}^A$  feszültség ellenében végzett munka miatt, ugyanannyival csökken a  $\sigma_{ij}^A$  feszültségtérben bekövetkező energiaváltozás miatt. A kölcsönhatás következtében fellépő teljes energiaváltozás ezért most is a (40) alatti kifejezéssel egyenlő.

### 3. Diszlokációk és térfogati hibák kölcsönhatása

A kristályos szilárd testekben diszlokációk és az alapanyagtól eltérő tulajdonságú atomok mindig találhatók. Ezek kölcsönhatása a kristály tulajdonságait lényegesen megváltoztathatja. Különösképpen érvényes ez a fémes ötvözetekre, amelyekben az ötvöző elem atomjai vagy oldott atomokként, vagy kiválások formájában nagy számban vannak jelen. A diszlokációk és idegen atomok közötti kölcsönhatás természetének megismerése alapvetően fontos a szilárd testek tulajdonságainak megértésében.

Az oldott atom inhomogén térfogati hibát jelent, mert méretei és rugalmas állandói különböznek az alapanyag atomjának méretétől és rugalmas állandóitól. Valamely feszültségtérrel való kölcsönhatásuk tehát két lépésben számítható ki. Az első lépésben az oldott atomot helyettesítjük (27)-nek megfelelően homogén térfogati hibával. Ekkor a kölcsönhatási energiát (23), illetve (31) adja meg. Ezt a járulékot nevezik mérthatásnak. A második lépésben az oldott atomot inhomogenitásnak tekintjük. Ekkor a kölcsönhatási energiát (36) és (40) alapján számítjuk ki (moduluszhatás). A teljes kölcsönhatási energia a méret- és moduluszhatásból eredők összegével egyenlő.

Számításainkban az oldott atomokat és a mátrixban elképzelt üregeket gömb alakúnak tételezzük fel.

Ekkor az oldott atommal ekvivalens térfogati hiba feszültségmentes transzformációja (27) alapján

$$\varepsilon_{ij}^T = \frac{\kappa^*}{\alpha(\kappa^* - \kappa) + \kappa} \cdot \frac{1}{3} \frac{\Delta V}{V_0} \delta_{ij}, \quad (44)$$

ahol  $\Delta V = V'_0 - V_0$ ,  $V'_0$  az oldott atom,  $V_0$  a mátrix egy atomjának térfogata.

Mivel az oldott atomok kiterjedése kicsiny, a kölcsönható feszültségtérrel a hiba térfogatában állandónak vehetjük.

Ezért a méretkülönbségből származó kölcsönhatási energia (23) alapján

$$E_{ks} = - \frac{V_0}{3} \frac{\kappa^*}{\alpha(\kappa^* - \kappa) + \kappa} \frac{\Delta V}{V_0} \sigma_{ii}^A. \quad (45)$$

Eredményünk szerint a gömbszimmetrikus térfogati hibák csak hidrosztatikus feszültségtérrel lépnek kölcsönhatásba.

A modulusz effektusból származó kölcsönhatási energiát (40)-ből határozhatjuk meg. Felhasználva, hogy tetszőleges  $\sigma_{ij}$  és  $\varepsilon_{ij}$  tenzorok esetén

$$\sigma_{ij} \varepsilon_{ij} = \frac{1}{3} \sigma_{kk} \varepsilon_{ii} + \sigma'_{ij} \varepsilon'_{ij},$$

(36)-tal kapjuk

$$E_{KM} = -\frac{V_h}{2} \left\{ \frac{A}{9\kappa} (\sigma^A)^2 + \frac{B}{2\mu} \sigma_{ij}^{A'} \cdot \sigma_{ij}^A \right\}, \quad (46)$$

ahol

$$A = \frac{\kappa^* - \kappa}{\alpha(\kappa - \kappa^*) - \kappa}, \quad B = \frac{\mu^* - \mu}{\beta(\mu - \mu^*) - \mu}.$$

A következőkben alkalmazzuk a (45) és (46) összefüggéseket néhány speciális diszlokáció esetére.

### 3.1. Végtelen éldiszlokáció

#### 3.1.1. Mérethatás

Az éldiszlokáció nullától különböző feszültség komponensei [11] (1. ábra)

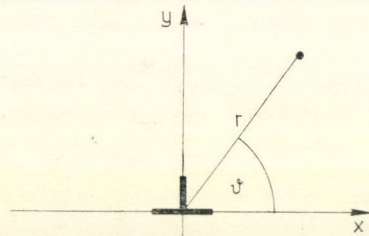
$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \vartheta (2 + \cos 2\vartheta)}{r}, & \sigma_{22} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \vartheta \cos 2\vartheta}{r}, \\ \sigma_{12} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \vartheta \cos 2\vartheta}{r}, & \sigma_{33} &= -\frac{\nu \mu b}{\pi(1-\nu)} \frac{\sin \vartheta}{r}. \end{aligned} \quad (47)$$

A feszültség tenzor hidrosztatikus komponense:

$$\sigma_{ii} = -\frac{\mu b}{\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\sin \vartheta}{r}. \quad (48)$$

Ezt (45)-be helyettesítve megkapjuk a mérethatásból származó kölcsönhatási energiát mint a hely függvényét:

$$E_{Sk}^e = \frac{\mu b(1+\nu)V_0}{3\pi(1-\nu)} \cdot \frac{\kappa^*}{\alpha(\kappa^* - \kappa) + \kappa} \cdot \frac{\Delta V}{V_0} \cdot \frac{\sin \vartheta}{r}. \quad (49)$$



1. ábra. Az éldiszlokáció feszültségteréhez

Ebből  $\kappa^* = \kappa$  esetén a Cottrell-féle kifejezés adódik [2]. Látható, hogy ha  $\Delta V > 0$ , azaz az oldott atom mérete nagyobb, mint a mátrix atomoké, akkor a éldiszlokáció körül a komprimált zónában ( $\sin \vartheta > 0$ ) a kölcsönhatási energia pozitív, míg a dilatált zónában ( $\sin \vartheta < 0$ ) negatív. Ha  $\Delta V < 0$ , akkor a fordított helyzet áll elő. Mindez azt jelenti, hogy az éldiszlokáció és az oldott atomok között mindig létezik vonzó kölcsönhatás. Ez adja a magyarázatát annak, hogy a diszlokáció mentén a szennyező atomok feldúsulnak. Ha a hőmérséklet nem túl alacsony, a vonzó kölcsönhatás eredményeként az oldott atomok egy része a diszlokáció vonal közvetlen környezetében helyezkedik el. Az ekkor fellépő maximális ( $\sin \vartheta = 1$ ) kölcsönhatási energiát az oldott atom diszlokációhoz való kötési energiájának ( $E_{bs}$ ) nevezhetjük.

A kötési energiának néhány speciális esetre vonatkozó kiszámításához szorít-



kozzunk csak a tiszta mérrethatásra, azaz legyen  $\kappa^* = \kappa$ . Az oldott atom diszlokációtól való minimális távolságát  $b$ -nek véve [6], a kötési energiára kapjuk

$$E_{bs}^e = \frac{\mu V_0}{3} \frac{1+\nu}{\pi(1-\nu)} \frac{\Delta V}{V_0}. \quad (50)$$

A tapasztalat szerint a szilárd oldatokban, legalábbis egy határ koncentrációig az egy atomra jutó átlagos  $V$  térfogat lineáris függvénye az oldott atomok  $c$  koncentrációjának [12]:

$$V(c) = (1-c)V_0 + cV^*,$$

ahol  $V_0$  az egy atom térfogata tiszta anyag esetén,  $V^*$  az oldott atomokra jellemző állandó. Ez a térfogatváltozás az oldott atomok méretkülönbsége miatt lép fel.

Ha az oldott atomok száma  $N_s$ , az összes atomok száma  $N$ , akkor  $c = \frac{N_s}{N}$  és az egy oldott atom által okozott térfogatváltozás

$$\Delta V' = \frac{N(V - V_0)}{N_s} = c(V^* - V_0) \frac{N}{N_s} = V^* - V_0.$$

Ebből az egy oldott atomra eső relatív térfogatváltozás, az ún. térfogati méretfaktor

$$\eta_v = \frac{\Delta V'}{V_0} = \frac{V^* - V_0}{V_0} = \frac{1}{V_0} \frac{\partial V}{\partial c}. \quad (51)$$

Figyelembe kell még vennünk, hogy a (44) feszültségmentes transzformációban megjelenő  $\Delta V/V_0$  az oldott atom „szabad” térfogatának az üreghez képest relatív különbsége, míg  $\eta_v$  az oldott atom deformált (mátrixbeli) térfogatára vonatkozik. A (7) egyenlet szerint a két mennyiséget az alábbi összefüggés kapcsolja össze

$$\frac{\Delta V}{V_0} = 3 \frac{1-\nu}{1+\nu} \eta_v.$$

Ha felhasználjuk még, hogy felületcentrált köbös kristály esetén az egy atom térfogata

$$V_0 = \frac{4\pi}{3} \left( \frac{b}{2} \right)^3,$$

akkor a kötési energia az éldiszlokáció és egy oldott atom között

$$E_{bs}^e = \frac{1}{6} \mu b^3 \eta_v. \quad (52)$$

$\eta_v$  értéke kísérletileg meghatározható. Az irodalomból ismert adatok ([12]) felhasználásával kapott, a mérrethatásra jellemző kötési energiákat néhány réz és alumínium alapú szilárd oldat esetén az 1. táblázat mutatja.

## 1. TÁBLÁZAT

Oldott atomok kötési energiája éldiszlokációra Al és Cu alapú ötvözetek esetén

Al $\mu = 2,7 \cdot 10^{11} \text{ din/cm}^2, \quad b = 2,86 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$			Cu $\mu = 4 \cdot 10^{11} \text{ din/cm}^2, \quad b = 2,55 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$		
Oldott atom	$\eta(\%)$	$E_{bS}^e(\text{eV})$	Oldott atom	$\eta(\%)$	$E_{bS}^e(\text{eV})$
Zn	- 5,74	0,037	Zn	+ 17,10	0,117
Si	- 15,78	0,103	Cr	+ 19,72	0,135
Cu	- 37,77	0,247	Al	+ 19,99	0,138
Ag	+ 0,12	0,080	Ag	+ 43,32	0,300
Sn	+ 24,09	0,159	Au	+ 47,59	0,327
Mg	+ 40,82	0,267	Sn	+ 83,40	0,572

## 3.1.2. Módulushatás

Az éldiszlokációnak egy oldott atommal, mint inhomogenitással való kölcsönhatását a (46) egyenlet jellemzi. Felhasználva a (47) összefüggéseket a moduluszhatásból származó kölcsönhatási energiára a következő kifejezést kapjuk:

$$E_{kM}^e = -\frac{\mu b^2 V_h}{8\pi^2(1-v)^2 r^2} \left\{ [(1-v-2v^2)A + (2v^2-2v-1)B] \frac{2 \sin \vartheta}{3} + B \right\}. \quad (53)$$

Ebből rögtön megkaphatjuk egy üres rácshely (vakancia) és az éldiszlokáció közti kölcsönhatási energiát [13]. A vakancia olyan szennyező atomnak felel meg, amelyre  $\kappa^* = 0$ ,  $\mu^* = 0$ , azaz vakancia esetén

$$A = \frac{3}{2} \frac{1-v}{1-2v}; \quad B = \frac{15(1-v)}{7-5v},$$

amivel

$$E_{kvak}^e = -\frac{15\mu b^2 V_h}{8\pi^2(1-v)(7-5v)} \left[ 1 - \frac{1+6v-5v^2}{5} \sin^2 \vartheta \right] \frac{1}{r^2}. \quad (54)$$

A kölcsönhatási energia minden  $\vartheta$  esetén negatív, tehát az éldiszlokáció minden irányból vonzza a vakanciát. A maximális kötési energiára ( $\vartheta = 0$ ,  $r = b$ ) kb. 0,15 eV adódik.

Az oldott atomokkal való kölcsönhatás közelebbi vizsgálatához célszerű a rugalmas állandók különbségét tartalmazó  $A$ ,  $B$  mennyiségeket ismét makroszkopikus paraméterekre visszavezetni [14].

Tekintsünk egy homogén testet, amelyen  $\sigma_{ij}^A$  külső feszültség van. Ennek rugalmas energiája

$$E_0 = \frac{1}{2} NV_0 \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A = \frac{1}{2} NV_0 \left\{ \frac{1}{9\kappa} (\sigma^A)^2 + \frac{1}{2\mu} \sigma_{ij}^A \cdot \sigma_{ij}^A \right\},$$

ahol  $N$  az atomok száma,  $V_0$  az atomtérfogot,  $\kappa$  és  $\mu$  a test makroszkopikus rugalmas állandói. Cseréljük ki gondolatban a test  $N_S$  számú atomját idegen (oldott) atomra. Ekkor a rugalmas energia az oldott atomok, mint inhomogenitások hatására megváltozik. Ha az inhomogenitás rugalmas állandói  $\kappa^* > \kappa$  és  $\mu^* > \mu$ , azaz a (46) kifejezésben  $A < 0$  és  $B < 0$ , és így  $E_{kM} > 0$ , akkor a test rugalmas energiája  $E_0$ -hoz



képest csökken, mert ugyanazon feszültség kisebb deformációt hoz akkor létre és fordítva. Ezért az  $N_S$  számú inhomogenitást tartalmazó test rugalmas energiája

$$E_{\text{rug}} = E_0 - E_{kM} = \\ = \frac{1}{2} NV_0 \left\{ \frac{1}{9\kappa} (\sigma^A)^2 + \frac{1}{2\mu} \sigma_{ij}^A \cdot \sigma_{ij}^A \right\} + \frac{1}{2} N_s V_h \left\{ \frac{A}{9\kappa} (\sigma^A)^2 + \frac{B}{2\mu} \sigma_{ij}^A \cdot \sigma_{ij}^A \right\},$$

ahol  $V_h$  az oldott atom térfogata. Felhasználva, hogy  $N_s = cN$ , ahol  $c$  az atom-koncentráció, kapjuk, hogy

$$E_{\text{rug}} = \frac{1}{2} NV_0 \left\{ \frac{1}{9} \frac{1+c \frac{V_h}{V_0} A}{\kappa} (\sigma^A)^2 + \frac{1}{2} \frac{1+c \frac{V_h}{V_0} B}{\mu} \sigma_{ij}^A \cdot \sigma_{ij}^A \right\}.$$

Ebből az inhomogenitásokat tartalmazó test makroszkopikus rugalmas állandói (híg szilárd oldatokra)

$$\kappa_m = \frac{\kappa}{1+c \frac{V_h}{V_0} A} \cong \kappa \left( 1 - c \frac{V_h}{V_0} A \right),$$

$$\mu_m = \frac{\mu}{1+c \frac{V_h}{V_0} B} \cong \mu \left( 1 - c \frac{V_h}{V_0} B \right).$$

Differenciálással kapjuk

$$\begin{aligned} -V_h \cdot A &= \frac{1}{\kappa} \frac{\partial \kappa_m}{\partial c} V_0 = \eta_\kappa V_0, \\ -V_h \cdot B &= \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu_m}{\partial c} V_0 = \eta_\mu V_0. \end{aligned} \quad (55)$$

$\kappa_m$  és  $\mu_m$  már mérhető mennyiségek. Látható, hogy az (53) energia kiszámításához elegendő ismernünk az alapanyag atomjainak térfogatát. Az utóbbi összefüggések felhasználásával (53) a következő alakú lesz

$$E_{kM}^e = \frac{\mu b^2 V_0}{8\pi^2 (1-v)^2 r^2} \eta_\mu \left\{ 1 - \frac{2}{3} \left[ (1+2v-2v^2) - (1-v-2v^2) \frac{\eta_\kappa}{\eta_\mu} \right] \sin^2 \vartheta \right\}. \quad (56)$$

A  $v = \frac{1}{3}$ ,  $V_0 = \frac{4\pi}{3} \left( \frac{b}{2} \right)^3$  adatokkal

$$E_{kM}^e = 0,015 \frac{\mu b^5}{r^2} \eta_\mu \left( \cos^2 \vartheta + 0,3 \frac{\eta_\kappa}{\eta_\mu} \sin^2 \vartheta \right). \quad (57)$$

Eredményünk azt mutatja, hogy ha  $\eta_\mu > 0$ ,  $\eta_\kappa > 0$ , akkor  $E_{kM}^e > 0$ , bármely  $\vartheta$  esetén, tehát a moduluszhatás nem eredményez szükségképpen vonzó kölcsönhatást. Az  $\eta_\mu$ ,  $\eta_\kappa$ -ra vonatkozó kísérleti adatok általában elég bizonytalanok, ezért az (57) energia konkrét kiszámítása helyett célszerű csak összehasonlítást tenni a méret-

hatás és a moduluszhatás kötési energiához való járulécai között. Mivel  $\eta_v/\eta_\mu < 3$  [14], ezért az (57) kifejezésben  $\vartheta = 0$  és  $r = b$  helyettesítéssel, valamint (52) felhasználásával kapjuk

$$\frac{E_{bs}^e}{E_{bM}^e} = 11 \frac{\eta_v}{\eta_\mu}.$$

$\eta_v/\eta_\mu$  értéke a legtöbb esetben kb.  $\frac{1}{3}$  [14], ezért éldiszlokáció esetén a moduluszhatás járuléka a kötési energiához a mérethatásénak kb. a negyedrésze.

### 3.2. Végtelen csavardiszlokáció

#### 3.2.1. Mérethatás

A mérethatásra kapott (45) kifejezés szerint a gömbszimmetrikus térfogati hiba csak hidrosztatikus feszültségtérrel hat kölcsön. A csavardiszlokáció feszültségtérének a lineáris rugalmas elmélet szerint hidrosztatikus komponense nincs. Másodrendű összefüggések alkalmazása azonban nullától különböző térfogati dilatációra vezet csavardiszlokáció esetén is. Stehle és Seeger számításai szerint [15]

$$\epsilon_{ii}^{cs} = \frac{K}{4\pi} \left( \frac{b}{r} \right)^2, \quad (58)$$

ahol a  $K$  állandó az atomok közti kötőerőre jellemző és értéke egy nagyságrendű. Ezt felhasználva a mérethatásból származó kölcsönhatási energia csavardiszlokáció és oldott atom között (45)-ből ( $\chi^* = \chi$ )

$$E_{ks}^{cs} = \frac{\mu K (1 - \nu) b^5}{12(1 - 2\nu) r^2} \eta_v. \quad (59)$$

$K$  általában negatív, ezért a kölcsönhatás vonzó, ha  $\eta_v > 0$  és taszító, ha  $\eta_v < 0$ . A  $\nu = \frac{1}{3}$ ,  $r = b$  értékek behelyettesítésével a kötési energia

$$E_{bs}^{cs} = \frac{\mu b^3 K}{6} \eta_v. \quad (60)$$

A csavardiszlokációval való mérethatás tehát összemérhető az éldiszlokációéval.

#### 3.2.2. Moduluszhatás

Csavardiszlokáció esetén a feszültségtenzor nullától különböző komponense a lineáris elmélet szerint [11]

$$\sigma_{13} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{\sin \vartheta}{r}, \quad \sigma_{23} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{\cos \vartheta}{r}.$$

Ezt (46)-ba helyettesítve (55) felhasználásával megkapjuk a moduluszhatásból származó kölcsönhatási energiát csavardiszlokáció és oldott atom esetére

$$E_{kM}^{cs} = \frac{\mu b^2 V_0}{8\pi^2 r^2} \eta_\mu. \quad (61)$$



A kölcsönhatás vonzó, ha  $\eta_\mu < 0$ , azaz  $\mu^* < \mu$  és taszító, ha  $\eta_\mu > 0$ , azaz  $\mu^* > \mu$ . Vonzó kölcsönhatás esetén a (61)-ből származó kötési energia

$$E_{bM}^{cs} = \frac{\mu b^3}{48\pi} \eta_\mu. \quad (62)$$

Vakancia esetén  $V_0 \eta_\mu = -V_h \frac{15(1-\nu)}{7-5\nu}$ , ezért a kölcsönhatási energia

$$E_{k\text{vak}}^{cs} = -\frac{15(1-\nu)V_h\mu b^2}{8\pi^2(7-5\nu)r^2}, \quad (63)$$

ami mindig negatív, tehát a csavardiszlokáció vonzza a vakanciát [13].

### 3.3. Kör alakú diszlokáció hurok

Az egyenes diszlokáció és oldott atomok közti kölcsönhatás ismerete lehetőséget nyújt arra, hogy kvantitatív becsléseket nyerjünk a kölcsönhatás szerepére valamely vizsgált fizikai folyamatban. A gyakorlatban azonban sokszor alkalmaznak pl. ötvözetek esetén olyan eljárásokat, amelyek szükségképpen diszlokáció hurkok keletkezésével járnak együtt. Ilyen eljárás pl. az ötvözetek edzése. Ez magas (olvadáspont közeli) hőmérsékleten való hőkezelést igényel, amelynek során az anyag megszabadul a belső mechanikai feszültségektől (diszlokációk) jelentős részétől, valamint legalábbis bizonyos ötvözetek esetén, homogén szilárd oldat alakul ki. Ezt a homogenizálási hőkezelést követően az anyagot nagy sebességgel lehűtve a magas hőmérsékleti egyensúlynak megfelelő szilárd oldat állapot befagyasztható. A befagyasztás során azonban nemcsak túltelített szilárd oldat alakul ki, hanem a termikus vakanciák is fölös számban lesznek jelen. Az edzést követő ún. megeresztés (hőkezelés, valamilyen közbülső, nem túl magas hőmérsékleten) során a túltelített oldatból az atomok diffúzió révén, külön fázisokban (kiválásokban) gyűlnek össze. Ezt megelőzően azonban a fölös vakanciák eltűnnek az anyagból, amely folyamat jelentős részben vakancia kondenzációval, s ennek eredményeként (prizmatikus) diszlokáció hurkok keletkezésével jár. Nyilvánvaló, hogy az így kialakuló diszlokáció hurkok és oldott atomok közti kölcsönhatás a kiválás megindulását és sebességét nagy mértékben befolyásolhatja.

A moduluszhatásból származó energia ebben az esetben igen bonyolult kifejezéssel adható meg [16]. A diszlokáció huroktól távol fekvő térfogati hibára a leírás egyszerűsödik, de a kicsiny hatótávolság miatt éppen a diszlokáció környezetében levő viszonyok lényegesek. Ezért a következőkben csak a tiszta méretheatásból ( $\kappa^* = \kappa$ ) származó kölcsönhatást tárgyaljuk. A kölcsönhatási energiát ekkor a (45) kifejezés adja meg.  $\sigma_{ii}^A = 3\kappa e_{ii}^A$  helyettesítéssel

$$E_{kS} = -V_0 \kappa \left( \frac{\Delta V}{V_0} \right) e_{ii}^A = -\frac{3V_0(1-\nu)}{1+\nu} \kappa \eta_V e_{ii}^A. \quad (64)$$

Felhasználva a III. (13) összefüggést

$$E_{kS} = -Cb_s \epsilon_{ksr} \oint R_{,rpp} dl'_k, \quad (65)$$



ahol

$$C = \frac{3V_0(1-2\nu)}{8\pi(1+\nu)} \kappa \eta_V \cong \frac{1}{24} \mu b^3 \eta_V, \quad R = |\vec{r} - \vec{r}'|. \quad (66)$$

$b_s$  a hurok Burgers-vektorának  $s$ -edik komponense, a körintegrált pedig a diszlokáció vonal mentén kell képeznünk. A körintegrál kiszámításához vegyük figyelembe, hogy  $R_{,pp} = \frac{2}{R}$ , és így

$$E_{ks} = -2Cb_s \epsilon_{ksr} \nabla_r \oint \frac{dl'_k}{R}. \quad (67)$$

Prizmatikus hurok esetén  $\vec{b} = (0, 0, -b)$ , ha a hurok az  $(x, y)$  síkban fekszik. A kölcsönhatási energia ekkor

$$E_{ks}^p = -2Cb \left( \frac{\partial}{\partial x} \oint \frac{dy'}{R} - \frac{\partial}{\partial y} \oint \frac{dx'}{R} \right). \quad (68)$$

Csúszási hurok esetén pedig  $\vec{b} = (b, 0, 0)$ , és így

$$E_{ks}^{cs} = 2Cb \frac{\partial}{\partial z} \oint \frac{dy'}{R}. \quad (69)$$

A fenti típusú integrálok kiszámítását sorozatunk III. részében (3. pont) elvégeztük. Legyenek az oldott atom koordinátái  $(x, y, z)$ , az  $\vec{r} = (x, y, 0)$  vektornak az  $x$  tengellyel bezárt szöge  $\alpha$ , akkor a III. 3. pontban követett gondolatmenet megismétlésével a következő kifejezéseket kapjuk

$$E_{ks}^p = -2Cb \left( \frac{I_0}{r} + \frac{\partial I_0}{\partial r} \right),$$

$$E_{ks}^{cs} = 2Cb \cos \alpha \frac{\partial I_0}{\partial z},$$

ahol

$$I_0 = \frac{4a}{k^2 \sqrt{(r+r')^2 + z^2}} [(2-k^2)K - 2E].$$

Itt  $K$  és  $E$  az első-, ill. másodfajú elliptikus integrált jelöli, „ $a$ ” a hurok sugara és

$$k^2 = \frac{4ar}{(a+r)^2 + z^2}.$$

A kijelölt deriválásokat elvégezve

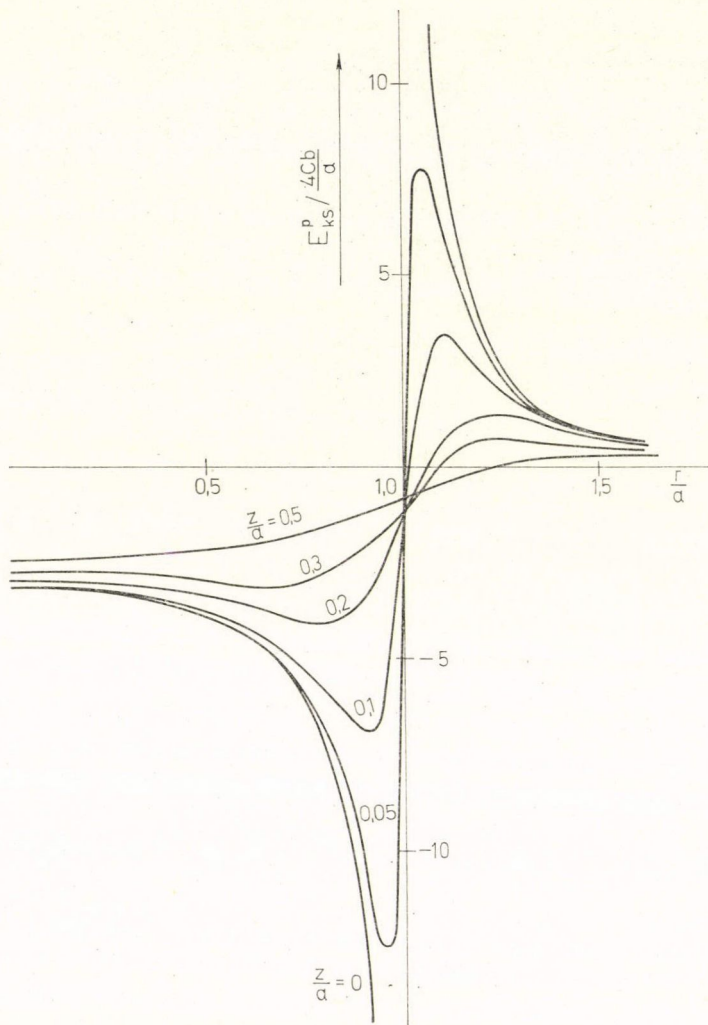
$$E_{ks}^p = -\frac{4Cb}{\sqrt{(a+r)^2 + z^2}} \left[ K + \frac{a^2 - r^2 - z^2}{(a-r)^2 + z^2} E \right], \quad (70)$$

$$E_{ks}^{cs} = \frac{4C bz \cos \alpha}{r \sqrt{(a+r)^2 + z^2}} \left[ -K + \frac{a^2 + r^2 + z^2}{(a-r)^2 + z^2} E \right]. \quad (71)$$



A kölcsönhatási energiát a hely függvényében a 2., 3. ábra mutatja. Látható, hogy a különböző  $z$  koordinátájú síkokhoz tartozó energia görbéken jól definiált minimum van, ami kötött állapotok kialakulását eredményezi.

Ha  $a \rightarrow r$  és  $z \rightarrow 0$ , akkor mindkét energia kifejezés divergál (2., 3. ábra). Ezt a divergenciát az egyenes diszlokációk esetén is követett gondolatmenettel kerülhetjük el. Fizikailag nyilvánvaló, hogy az oldott atom a diszlokáció vonalat csak egy minimális távolságra közelítheti meg. Ezt a távolságot ismét  $b$ -nek vehetjük, amivel a maximális kötési energiát megbecsülhetjük. A 2. ábra alapján a maximális kötési



2. ábra. Oldott atom és prizmatikus diszlokáció hurok közötti kölcsönhatási energia a hely függvényében (méréthatás)

energia prizmatikus hurok esetén a  $z=0$  síkban az  $r = a-b$  helyen lép fel. Ekkor feltéve, hogy  $a \gg b$

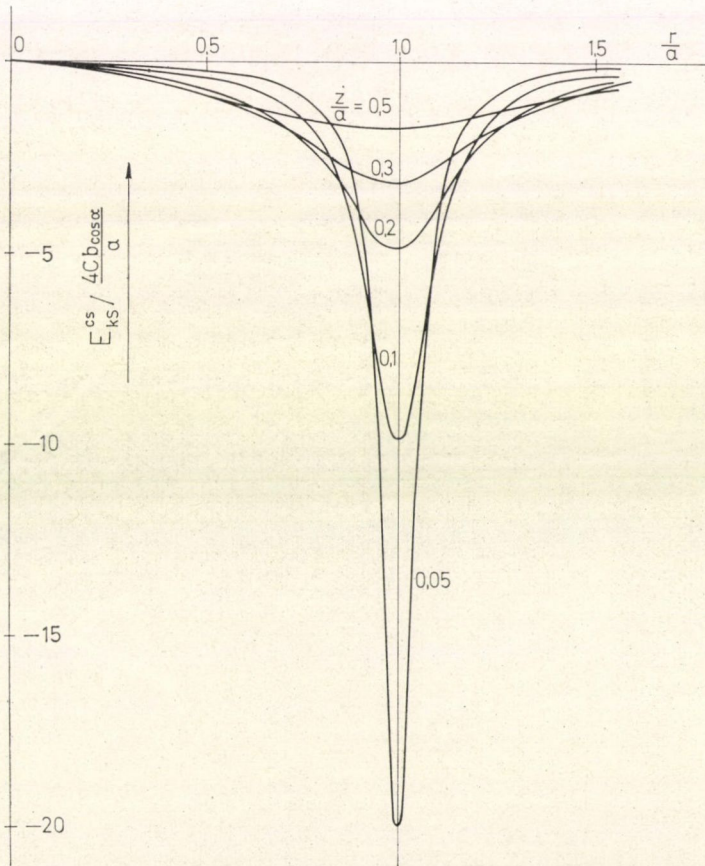
$$k^2 = 1 - \frac{b^2}{4a^2} \approx 1,$$

és ezzel

$$K \cong \ln \frac{8a}{b}, \quad E \cong 1.$$

A maximális kötési energia tehát (70)-ből (66) és (52) felhasználásával

$$E_{bs}^p_{\max} = \left( 1 + \frac{b}{2a} \cdot \ln \frac{8a}{b} \right) |E_{bs}^e|. \quad (72)$$



3. ábra. Oldott atom és csúszási diszlokáció közötti kölcsönhatási energia a hely függvényében (méréthatás)



A csúszási hurok esetén a maximális kötési energia helyének koordinátái  $r=a$ ,  $z=b$  (3. ábra). Az előzőhöz hasonló megfontolással kapjuk, hogy

$$E_{bs}^{cs} \max = \left( 1 - \frac{b^2}{2a^2} \cdot \ln \frac{8a}{b} \right) |E_{bs}^e| \cos \alpha. \quad (73)$$

Kifejezéseink  $a \rightarrow \infty$  esetén (a diszlokáció gyűrű egyenes diszlokációba megy át) a tiszta éldiszlokációval, illetve a diszlokációvonallal  $90^\circ - \alpha$  szöget bezáró Burgers vektorú, ún. kevert diszlokációval való kölcsönhatási energiát adják meg.

Elektronmikroszkópos vizsgálatok szerint a befagyasztáskor keletkező diszlokáció hurkok sugara  $a = 100b - 1000b$  nagyságrendű. A (72), (73) összefüggésben szereplő korrekciós tagok tehát általában elhanyagolhatók, ezért a maximális kölcsönhatási energia a hurok sugártól függetlenül az éldiszlokációval való kötési energiával egyenlő prizmatikus, és ezzel arányos csúszási hurok esetén.

Köszönetet szeretnék mondani Nagy Elemér professzor úrnak a témakörrel kapcsolatban folytatott diszkusszióért, továbbá Menyhárd Miklósnak, aki diplomamunkájában [17] a számítások egy részét elvégezte.

#### IRODALOM

- I. Kovács István, Magy. Fiz. Folyóirat, 13, 182, 1965.
- II. Chatel Péter és Kovács István, Magy. Fiz. Folyóirat 13, 384, 1965.
- III. Kovács István és Chatel Péter, Magy. Fiz. Folyóirat, 14, 16, 1966.
- A. H. Cottrell, Report of a Conference on Strength of Solids, The Physical Society, London, 1948. p. 30.
- F. R. N. Nabarro, Report of a Conference on Strength of Solids, The Physical Society, London, 1948. p. 38.
- A. H. Cottrell and B. A. Bilby, Proc. Phys. Soc. A62, 49, 1949.
- B. A. Bilby, Proc. Phys. Soc. A63, 191, 1950.
- N. F. Fiore and C. L. Bauer, The Binding of Solute Atoms to Dislocations, Progress in Material Science, 13, 85, 1968. Pergamon Press, New York.
- A. H. Cottrell, S. C. Hunter and F. R. N. Nabarro, Phil. Mag. 44, 1064, 1953.
- R. de Wit and R. E. Howard, Acta Met. 13, 655, 1965.
- J. C. Fisher, Acta Met. 2, 9, 1954.
- J. D. Eshelby, Progress in Solid Mechanics, II. p. 89. North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1961.
- Kovács István és Zsoldos Lehel, Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
- H. W. King, Journal of Materials Science, 1, 79, 1966.
- R. Bullough and R. C. Newman, Phil. Mag. 7, 529, 1962.
- I. Saxl, Czech. J. Phys. B14, 381, 1964.
- H. Stehle und A. Seeger, Z. Phys. 146, 217, 1956.
- J. Bastecka and F. Kroupa, Czech. J. Phys. B14, 443, 1964.
- Menyhárd Miklós, Diplomamunka, ELTE, 1968.



# VIZSGÁLATOK RADIOAKTÍV BOMLÁSFOLYAMATOK TÖRVÉNYSZERŰSÉGEINEK TISZTÁZÁSÁRA\*

BERÉNYI DÉNES

MTA Atommag Kutató Intézete (ATOMKI), Debrecen

## 1. Bevezetés

Az atommagból akár magreakciókban, akár radioaktív bomlásokban kilépő különféle sugárzások analíziséből, azaz a magspektroszkópiai vizsgálatokból két különböző típusú információt szerezhetünk a dolog természetéből kifolyólag: egyrészt magára, a magra, a magszerkezetekre, másrészt a magot alkotó nukleonok között ható erőkre, tehát az ún. alapvető kölcsönhatásokra vonatkozóan. Az utóbbi években egyre jobban előtérbe kerültek az utóbbi típusú vizsgálatok. Ilyen volt már az a kísérlet több, mint tíz évvel ezelőtt, amellyel a paritás sértést kimutatták a béta-bomlásban, legújabban pedig az, amelyikkel a mag gamma-átmeneteire bizonyították be, hogy a paritásra azokban se érvényes szigorú megmaradás. De ide kell sorolni azokat a vizsgálatokat is, amelyek az időinvarianciára vonatkoznak a különböző kölcsönhatásokban, vagy az ún. CVC elmélet (vektor áram megmaradás a béta-bomlásban) igazolására, illetve a kettős béta-bomlás kimutatására, a magerők töltésfüggetlenségére és így tovább.

Igaz, hogy az ilyen utóbbi típusú kísérletek általában sokkal fáradtságosabbak, hosszadalmasabbak, több ötletességet és eredetiséget kívánnak, több gondolkozást, kevesebb technikát és rutint, mint a szokásosabb magspektroszkópiai vizsgálatok („decay scheme work”). Arról van ugyanis szó, hogy ezek a jelenségek legtöbbször, mint más nagyobb valószínűségű folyamatokra szuperponálódott magasabb rendű effektusok jelentkeznek, azaz ilyen jellegű információkat sok esetben *maguknak a sugárzási folyamatoknak*, illetve az ezen folyamatoknál jelentkező magasabb rendű effektusoknak a kimutatásából vagy még megbízhatóan ki nem mutatott, ismeretlen, új, magasabb rendű sugárzási folyamatok tanulmányozásából kaphatjuk.

Azon, hogy magfizikai vizsgálatokból nehéz és fáradtságos az alapvető kölcsönhatásokra információkat kapni, nem csodálkozhatunk. Hiszen más oldalról a nagy energiájú fizikában viszont hatalmas gyorsítókra és igen költséges kiegészítő berendezésekre van szükség. Az alapvető kölcsönhatások, a természet fizikai alapjaiba való betekintés nem könnyű dolog. Ugyanakkor a két oldalról (a kis és nagy energiájú kísérletekből) a fundamentális kölcsönhatásokra kapott információk kölcsönösen kiegészítik egymást, teljesebbé teszik a kialakuló képet.

A fenti szempontok vezetnek bennünket az ATOMKI magspektroszkópiai osztályán, amikor akár az elektronbefogás vagy a belső konverzió, vagy a belső fékezési sugárzás különböző típusainak mélyebb megismerése, a velük kapcsolatos tisztázatlan kérdésekre vonatkozólag tervezünk és kivitelezünk vizsgálatokat. Ebben a cikkben az utóbbi években elért ilyen jellegű eredményeket foglaljuk össze.

\* Az MTA TMB-hoz benyújtott akadémiai doktori disszertáció egy része.  
Érkezett 1969. júl. 4.







$I$ -tiltott lenne. A béta-spektrum alak vizsgálatok ugyanis nem mondanak ellent kisebb eltérésnek a megengedett alaktól [15], a béta-gamma szöggkorrelációnál pedig egyesek nagy anizotrópiát mértek [14], mások cáfolják ezt [16]. Éppen ezért az  $\varepsilon/\beta^+$  viszony megmérése perdöntő adatot szolgáltathat a kérdés eldöntésére, mivel az elmélet szerint — mint már említettük — az igazi  $I$ -tiltott esetben az  $\varepsilon/\beta^+$  is különböző kell legyen a megengedett értéktől, míg kedvezőtlenül megengedett átmeneteknél meg-egyezik a megengedett értékkel [10].

A szóban forgó átmenetre eddig csak egy közelítő érték lett megadva az  $\varepsilon/\beta^+$  viszonyra vonatkozólag — hiba feltüntetése nélkül — *Sakai* és munkatársai egy 1954-es cikkében [17]. Ez az érték 0,35, ugyanakkor, amikor a megengedett elméleti érték 0,10 [18, 19]. *Sakai* adata arra mutat, mintha a  $^{56}\text{Co}$  szóban forgó átmenete valóban  $I$ -tiltott lenne. Ebben az esetben ez az átmenet volna az első  $I$ -tiltott, amelyre az  $\varepsilon/\beta^+$  meg lett határozva.

Méréseinkben [11, 20] a szóban forgó nivóra ( $^{56}\text{Fe}$  második gerjesztett nivója) vezető pozitron csoport  $k$  relatív intenzitását határoztuk meg két különböző módszerrel. Az egyik a *Blue* és *Bleuer* [21], valamint *Wapstra* és munkatársai [22, 23] által kidolgozott béta-gamma koincidencia módszer volt. Ezekben a mérésekben intézetünk toroid béta-spektrométerét [24–26] alkalmaztuk egy a forrás mögött elhelyezett szcintillációs gamma-spektrométerrel kiegészítve. Ez utóbbi a jelenlegi béta-gamma koincidencia mérésekben az 1,24 MeV-os gamma-csúcsra volt beállítva.

A másik módszert korábban már használtuk [27], de most tökéletesítettük. Ebben összehasonlítottuk a  $^{56}\text{Co}$  kérdéses  $\beta^+$ -spektruma alatti területet a  $^{22}\text{Na}$  jól ismert  $\beta^+$  elágazási viszonyú izotóp  $\beta^+$  spektruma alatti területtel. Ugyanakkor megmértük az alkalmazott  $^{56}\text{Co}$  és  $^{22}\text{Na}$  források relatív intenzitását gamma-spektrumuk összehasonlítása alapján.

A béta-gamma koincidencia mérésnél korrekciót alkalmaztunk a háttérre, a számlálási veszteségekre, az impulzusok instrumentális szuperpozíciójára, a nagyobb energiájú gamma-sugaraktól eredő Compton-eloszlásra és a véletlen koincidenziákra.

A  $^{56}\text{Co}$  radioaktív anyagot Angliából, az Amersham-i Radiokémiai Központból kaptuk. A preparátumban jelen levő kisebb  $^{57}\text{Co}$  és  $^{58}\text{Co}$  szennyezés jelen méréseinkben nem volt zavaró.

A  $k(4^+ \rightarrow 4^+)$  értékének meghatározásához mindkét módszer esetében ismernünk kell az 1240 keV-os gamma-sugárzás relatív intenzitását, valamint a 2085 keV-os nivó relatív populációját a  $^{56}\text{Co}$  bomlásában. Ezeket az adatokat a Nuclear Data Sheets-ből vettük [12]. Ezek hibáit *Cook* és *Tomnovec* [28], valamint *Daniel* és munkatársai [16] adatai alapján vettük figyelembe. Meg kell jegyezni, hogy a  $k$  érték hibájához a döntő hozzájárulást éppen ez utóbbi adatok adják.

A  $k(4^+ \rightarrow 4^+)$  definíció szerint  $k = N_{\beta^+}/(N_{\beta^+} + N_e)$ , ahol az  $N_{\beta^+}$ ,  $N_e$  jelentik a kiválasztott nivóra adott idő alatt érkező pozitív béta-bomlási, illetve elektron befogási átmenetek számát. Az  $\varepsilon/\beta^+$  viszony tehát

$$\frac{\varepsilon}{\beta^+} = \frac{N_e}{N_{\beta^+}} = \frac{1-k}{k}.$$

Tekintve, hogy  $(1-k)/k$  relatív hibája  $(\Delta k/k)$ .  $1/(1-k)$ , ez azt jelenti, hogy ha  $k$  közel egységnyi, a  $k$  relatív hibáját egy nagy számmal kell szorozni, hogy az  $\varepsilon/\beta^+$  relatív hibáját megkapjuk. Ilyen esetben, így a mi esetünkben is, célszerűbb az elméleti  $k$  értékét kiszámítani és ezt összehasonlítani a kísérleti értékkel. Egy ilyen össze-



## 1. TÁBLÁZAT

A  $k$  relatív  $\beta^+$  elágazási koefficiens a  $^{56}\text{Co}$  alapállapotából a  $^{56}\text{Fe}$  2085 keV-os második gerjesztett állapotába vezető  $4^+ \rightarrow 4^+$  nagy log ft-jű (8,7) átmenetben

Hivatkozás	Sakai és mtsi [17]	Cook és Tomnovec* [28]	Berényi és Kazai [11]	Berényi és Kazai [11]	Berényi és mtsi [20, 154]	A 2-4 oszlopban megadott értékek súlyozott átlaga	Zweifelf [18, 19]
Módszer	Szcintillációs spektrum analiziséből**	Szcintillációs spektrum analiziséből**	Beta-gamma koincidencia méréseiből	A $\beta^+$ spektrum intenzitása alapján	$4\pi\beta^+ - \gamma$ koincidencia méréseiből		Elméleti érték
$k$	0,719	$0,887 \pm 0,142$	$0,986 \pm 0,148$	$0,810 \pm 0,146$	$0,899 \pm 0,142$	$0,895 \pm 0,072$	0,907

\* Az itt adott értéket Cook és Tomnovec adatai alapján számoltuk, az eredeti közleményben  $k$ -ra nincsen semmiféle érték közölve

\*\* A szcintillációs spektrumban az annihilációs csúcs és a megfelelő gamma-csúcs (csúcsok) intenzitásának összehasonlításából

hasonlítás elvileg egyenértékű az  $\varepsilon/\beta^+$  viszony összehasonlításával, de az adott esetben pontosabb információt eredményez.

Az 1. táblázatban adjuk a  $k$ -ra vonatkozó kísérleti adatokat az elméletivel összehasonlítva. Megállapíthatjuk (lásd a táblázatot), hogy méréseink alapján a  $^{56}\text{Co}$  alapállapotából a  $^{56}\text{Fe}$  második gerjesztett állapotába (2085 keV) vezető  $4^+ \rightarrow 4^+$  átmenet magas log ft értéke [8,7] ellenére sem tekinthető szigorú értelemben vett  $I$ -tiltott átmenetnek.

A  $k$  érték újabb meghatározásáról nincs közlés az irodalomban. A mi eredményeinket felhasználták méréseik kiértékelésénél *Schöneberg* és munkatársai [29].

### 3. A belső konverziós koefficiensek viszonya magasabb héjakon a 364 keV-os átmenetnél a $^{131}\text{I}$ bomlásában

A legutóbbi években a belső konverziós folyamattal kapcsolatos kísérleti vizsgálatokban mind nagyobb szerepet kaptak a magasabb héjakon ( $M$ ,  $N$ ,  $O$ ) bekövetkező konverzióra vonatkozó mérések. Ugyanakkor az  $M$ -héjra és alhéjakra újabb, a korábbinál lényegesen pontosabb számítások történtek több különböző intézetben is, egymástól függetlenül [32—35]. Eddig csak *Rose* [36] számításai álltak rendelkezésre, amelyekben az  $M$ -héjra vonatkozó adatoknál sem a mag véges mérete, sem az árnyékolási effektusok nem voltak figyelembe véve.

*Wolfson* és munkatársai [37] néhány évvel ezelőtt részletes vizsgálatokat végeztek a  $^{131}\text{I}$  bomlásában a konverziós vonalakra vonatkozólag, azonban az  $L/M$  és az  $M/N+O$  belső konverziós viszonyokat ők sem határozták meg, még a bomlás legintenzívebb 364,5 keV-os gamma-átmenetében sem. Egy későbbi mérésben is [16] csak az  $L/MN$  lett megmértve.

A jelen vizsgálatokban [30, 31] meghatároztuk az  $M/L$  és az  $(N+O)/M$  konverziós viszonyokat, reprodukálva az  $L_I/L_{II}/L_{III}$  hányadosokat, amelyeket már *Wolfson* és munkatársai kimértek előbb említett munkájukban [37].

A méréseket intézetünk 75 cm maximális munkasugarú permanens béta-spektrográfjában



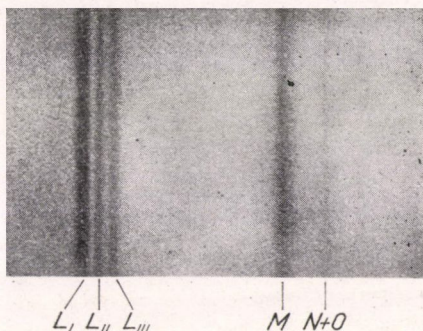
végeztük, amely speciálisan a magasabb héjakon végbemenő belső konverzió jelenségeinek a vizsgálatára lett konstruálva [38—42]. Néhány mC erősségű  $^{131}\text{I}$  forrást használtunk, amelyet úgy kaptunk, hogy egy 0,2 mm átmérőjű ezüst drótot egy egyszerű mechanizmus segítségével a jód-131-et tartalmazó oldatban forgattunk [43]. A detektálás a spektrográfban magfizikai fotoemulzió felhasználásával történt, amelyet egy fotodenzitométert felhasználva feketedés méréssel értékeltünk ki.

Meg kell említenünk itt, hogy az intenzitás mérések pontosságát spektrográfokban általában korlátozó tényezők [44] itt, ahol egészen közelfekvő vonalak relatív intenzitását határozzuk meg, lényegesen nagyobb pontosságot engednek meg. A kis  $q$  különbség miatt a transzmisszió változásban fellépő korrekció elhanyagolható, ugyanígy a fotografikus denzitás energia függése is az energia közel egyenlősége miatt a szóban forgó vonalaknál. A harmadik nehézséget általában az jelenti, hogy a feketedés méréssel kapott vonalakat a

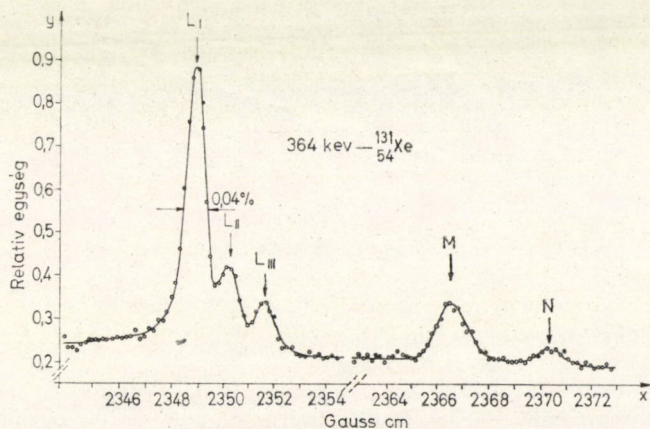
$$D = c_{10} \log(\varepsilon + 1)$$

összefüggéssel — amely a  $D$  fotografikus denzitást az  $\varepsilon$  elektron denzitással kapcsolja össze — kell átalakítanunk elektron eloszlássá. A  $c$  hibája, amelyet kísérletileg állapítunk meg, nagy. Esetünkben azonban a szóban forgó relatív konverziós vonal intenzitásokat kiszámítottuk nagyságrendileg különböző  $c$ -k mellett és az ilyen módon különböző  $c$ -k használata nem vezetett lényeges változásra a konverziós viszonyokban.

A 2. és 3. ábra mutatja a detektor-fotoemulzió kapott kép reprodukcióját, illetve a denzitometrállással kapott elektron spektrumot.  $M/L$  viszonyt a spektrum



2. ábra. Vonalak a  $^{131}\text{Xe}$  364 keV-os átmenetének belső konverziós spektrumában nagy feloldóképességű sávspektrográfban felvéve



3. ábra. Elektron spektrum a  $^{131}\text{Xe}$  364 keV-os átmenete L, M és N belső konverziós csoportjának megfelelő tartományban



kiértékeléséből a 2. táblázatban adjuk az elméleti értékekkel összehasonlítva. Megjegyezzük, hogy orientált magoknál végzett szögeloszlás mérésrel megállapították, hogy a 364 keV-os átmenet a  $^{131}\text{I}$  bomlásában majdnem tiszta E2, az E1 hozzákeveredés mértéke csak 2,2% [45]. A táblázat jól mutatja Hager és Seltzer [35] legújabban számított adataival az egyezést a hibahatáron belül. Ezekről az adatokról

## 2. TÁBLÁZAT

A kísérleti és elméleti értékek az  $M/L$  belső konverziós viszonyra a  $^{131}\text{Xe}$  364 keV-os átmenetében

M/L	Elméleti értékek						Jelen kísérleti érték
	Rose [36]		Hager és Seltzer [35]		Chu és Perlman [46]		
	E2	M1	E2	M1	E2	M1	
	0.385	0.405	0.220	0.211	0.239	0.195	0.195 ± 0.027

nem térnek el lényegesen a *Chu és Perlman* [46] módszerével számított értékek sem. *Chu és Perlman* az árnyékolási effektust az  $M$ -héjon félempirikusan vették figyelembe. A Rose-féle értékektől határozott eltérés tapasztalható, ezek kb. dupláját teszik ki a kísérleti értékeknek. Mindez az árnyékolási korrekció jelentős voltát mutatja az  $M$ -héjon végbemenő belső konverziós folyamatra.

Az  $(N+O)/M$  konverziós viszonyra kísérleti spektrumunk kiértékeléséből  $0,25 \pm 0,04$  érték adódott. Az  $(N+O)/M$  viszonyra vonatkozóan elméleti adat egyáltalán nincsen a jódnak megfelelő rendszámra. Legújabban azonban *Mladjenovic* és munkatársai [47] 12 különböző átmenetre 81-től 605 keV-ig terjedő energiával (a sugárzásokat kibocsátó nuklidok  $Z$ -je 56-tól 78-ig változott) áttekintették a szóban forgó viszony értékét E2 multipolaritás esetén. 0,21-től 0,30-ig változó értékeket találtak,  $0,26 \pm 0,04$  középértékkel. Ez a viszony tehát mind az energiától, mind a rendszámtól függetlenül konstansnak látszik. Méréseink ezt a megállapítást támogatják.

Felhasználva az  $(N+O)/M$  viszonyra kapott eredményünket *Daniel* és munkatársai [16]  $L/MN$  viszonyra vonatkozó adatából kiszámíthatjuk az ő méréseiből adódó  $M/L$  értéket. Az így kapott 0,202 érték a mi  $0,195 \pm 0,027$  értékünkkel igen jó egyezésben van.

## 4. Vizsgálatok a $^{36}\text{Cl}$ elektron befogását kísérő belső fékezési sugárzás spektrumára vonatkozólag

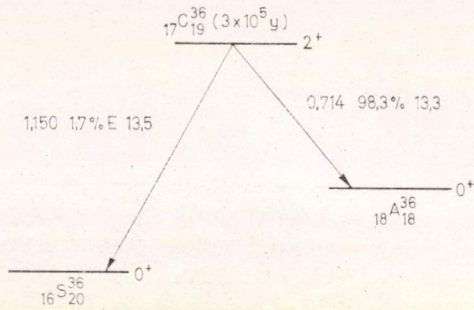
A  $^{36}\text{Cl}$  másodrendben nem egyértelműen tiltott elektron befogásos bomlását kísérő belső fékezési sugárzás felléptét már 1962-ben kimutatták [50, 51] és az első méréseket a belső fékezési spektrum alakjára és intenzitására vonatkozóan e cikk szerzője végezte [51–53]. Ezek a spektrum alakra vonatkozó első vizsgálatok a vizsgált tartományban egyenes Jauch-diagramot adtak, ami egy másodrendben nem egyértelműen tiltott bomlásban meglepő eredmény [54], ugyanígy a megengedett elméleti értéket nagyságrenddel felülmúló intenzitás is [53].



1964-ben egy zürichi csoport [55] a mi korábbi mérésünknel nagyobb pontossággal megvizsgálta a kérdéses spektrum alakot és a mi méréseinkkel [51] meg-  
egyező eredményre jutott.

Időközben azonban Koh elméleti vizsgálatokat végzett [56, 57] a radiatív elektron befogásra nagyobb energiáknál ( $2m_e c^2$  körül), Glauber és Martin elmélete ugyanis [58, 59], amelyik Morrison és Schiff eredeti számításait [60] tökéletesítette, arra az esetre vonatkoznak, amikor a belső fékezési sugárzási spektrum energiája jóval kisebb, mint  $2m_e c^2$ . Koh számításai szerint [57] a belső fékezési sugárzási spektrumban közel a  $2m_e c^2$  energiához, pontosabban  $2m_e c^2 - B_A$  energia értéknél, ahol  $B_A$  a kötési energia a megfelelő atomi elektron héjon, egy anomália kell jelentkezzen.

Tekintve, hogy a  $^{36}\text{Cl}$ — $^{36}\text{S}$  bomlásban (a bomlási sémát lásd a 4. ábrán) a pozitronok jelenléte kétségtől ki lett mutatva [50—52], az elektron befogásos átmenetre rendelkezésre álló teljes bomlási energia nagyobb, mint  $2m_e c^2$ . Az 1964. évi atomi tömeg táblázat szerint az átmeneti energia  $1135 \pm 9$  keV. Így ez az átmenet alkalmasnak látszik arra, hogy Koh számításait ellenőrizzük. Ezért határoztuk el, hogy a  $^{36}\text{Cl}$  elektron befogását kísérő belső fékezési sugárzási spektrumot a zürichi méréseket felülmúló pontossággal megismételjük a spektrum maximális energiája közelében, ahol a Koh-féle anomália megjelenése várható [48, 49].



4. ábra. A  $^{36}\text{Cl}$  bomlási sémája [55]

4. 1. Kísérleti részletek.

A méréseket a Központi Fizikai Intézet egész test számláló berendezésének a felhasználásával végeztük (a Bécsi Atomenergia Ügynökségnél HY 2.1 szám alatt nyilvántartva). Az egész test számláló kamra igen alacsony háttéré és a benne levő  $102 \times 152$  mm  $\varnothing$  méretű NaI(Tl) kristály (beszerezve: Nuclear Enterprises, Nagy Britannia) nagy érzékenysége tette lehetővé a belső fékezési sugárzási spektrum korábbi méréseket felülmúló pontossággal történő mérését.

Mérésünk és kiértékelési módszerünk ellenőrzésére a  $^{36}\text{Cl}$ -os mérésekkel azonos feltételek mellett megvizsgáltuk a  $^{55}\text{Fe}$  belső fékezési sugárzási spektrumát is, amelyik egyike a legrégebben és legtöbbet vizsgált spektrumoknak (pl. 61, 62).

A  $^{36}\text{Cl}$  esetében a radioaktív preparátum és forrás ugyanaz volt, mint amelyet korábbi méréseinkben (51, 52) is alkalmaztunk (The Radiochemical Centre, Amersham, Nagy Britannia). Aktivitása kb.  $50 \mu\text{C}$  volt. A forrástartó részletes leírását lásd [52]-ben.

A  $^{55}\text{Fe}$ -ös mérésekhez egy kb. 5 éves készítményt használtunk (a  $^{59}\text{Fe}$  kibomlása miatt), amelyet radiokémiai módszerekkel gondosan megtisztítottunk a további radioaktív szennyezésektől ( $^{54}\text{Mn}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ). A mérésnél használt megtisztított forrás erőssége kb.  $80 \mu\text{C}$  volt.

A  $^{36}\text{Cl}$ -ra vonatkozólag 51 egyórás méréssorozatot végeztünk. Egy-egy méréssorozaton belül félóráig mértük a háttérrel és félóráig mértünk a forrással. Minden egyes sorozat előtt és után ellenőriztük a berendezés stabilitását a  $^{65}\text{Zn}$   $1115,4 \pm 0,4$



keV-os [63] vonalával. Az 51 mérésből kiválasztottuk a 20 legstabilabbat, ahol a mérés tartama alatt az elmászás kisebb volt, mint  $\pm 1\%$ . A húsz mérés átlaga a megfelelő háttér adatokkal van feltüntetve az 5. ábrán, minden korrekció nélkül.

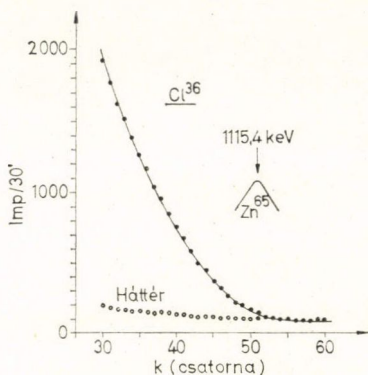
#### 4.2. Kiértékelés és eredmények.

Az 5. ábrán bemutatott kísérleti eloszlásból mindenekelőtt a háttér lett levonva. Az így kapott adatokat azután korrigáltuk, a szcintillációs detektor véges feloldóképességére, valamint a detektor hatásfokának energiafüggésére. A Compton-eloszlás miatt fellépő korrekció számításából kiderült, hogy ez a jelenleg a vizsgált tartományban elhanyagolható. A korrekciókra vonatkozó részleteket [49]-ben közöltük.

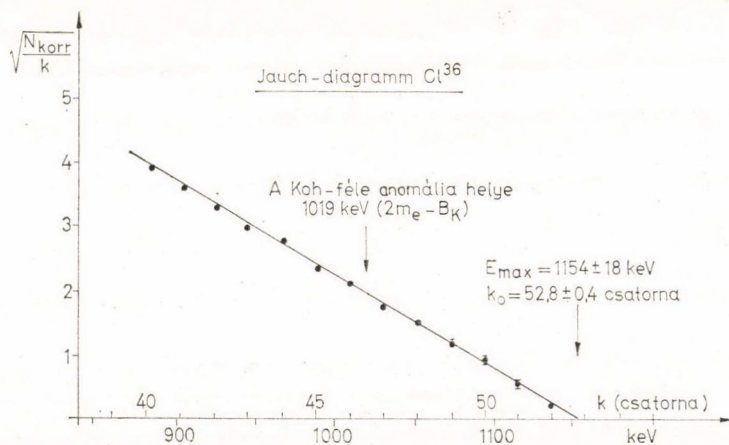
A hibák analízise azt mutatta, hogy a korrekcióktól eredő hiba általában elhanyagolható a statisztikus hiba mellett. Ezért a továbbiakban az erre a mérésre vonatkozó diagramokon a zászlócskák a statisztikus hiba nagyságát jelzik. Ahol a zászlócska nincs kitéve, ott a statisztikus hiba legfeljebb akkora, mint a nullkör sugara.

A fenti korrekciók elvégzése után megszerkesztett Jauch-diagramot mutatja a 6. ábra a  $^{36}\text{Cl}$  belső fékezési sugárzására, egy hasonló módszerrel korrigált adatokból szerkesztett Jauch-diagramot pedig a  $^{55}\text{Fe}$  belső fékezési sugárzására a 7. ábra. A spektrumok alakjáról még pontosabb információt ad az ún. alakfaktor diagram, amelyeknél az energia függvényében az  $N/(k_0 - k)^2$  mennyiséget

ábrázoljuk ( $k$  az energia, ill. csatornaszám,  $k_0$  a maximális energia, illetve csatornaszám). A Jauch-diagram egyenes voltának itt egy az  $x$ -tengellyel párhuzamos



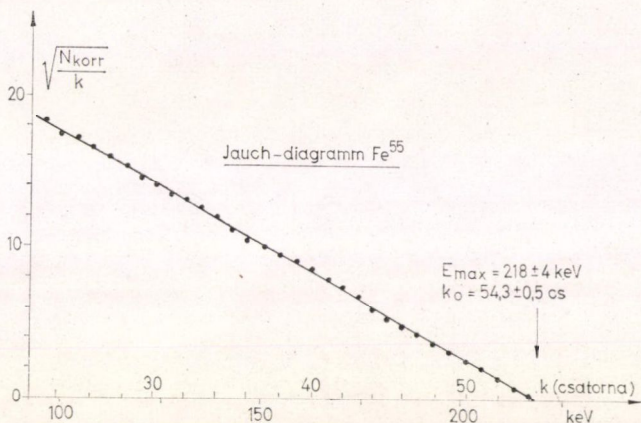
5. ábra. Korrekció nélküli kísérleti adatok a  $^{36}\text{Cl}$  elektron befogását kísérő belső fékezési sugárzásra vonatkozólag



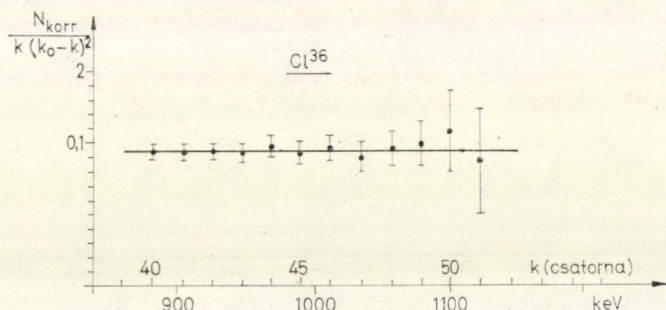
6. ábra. A  $^{36}\text{Cl}$  elektron befogását kísérő belső fékezési sugárzás spektrum Jauch-diagramja

egyenes felel meg. Ilyen a megengedett átmenet alakfaktora az energia függvényében. A 8. és 9. ábrán láthatjuk az alakfaktor diagramokat a  $^{36}\text{Cl}$ -ra, illetve a  $^{55}\text{Fe}$ -re.

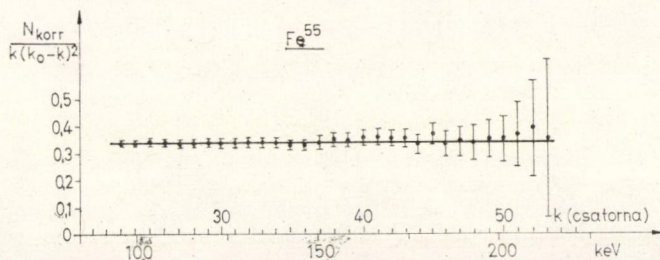
Méréseink szerint a 100 keV feletti tartományban a  $^{55}\text{Fe}$  belső fékezési sugárzásának alakfaktora konstans és értéke  $c(k) = 1,00 \pm 0,01$ . Ugyanezt lehet megállapítani a  $^{36}\text{Cl}$  vizsgált fékezési sugárzására a 875 keV-től a maximális energiáig terjedő tartományban, itt  $c(k) = 1,00 \pm 0,03$ .



7. ábra. A  $^{55}\text{Fe}$  belső fékezési sugárzásának Jauch-diagramja



8. ábra. Alakfaktor diagram a  $^{36}\text{Cl}$  elektron befogását követő belső fékezési sugárzásra



9. ábra. Alakfaktor diagram a  $^{55}\text{Fe}$  belső fékezési sugárzásra



## 4.3. Konklúziók.

A 6. és 8. ábrákból mindenképp előtérbe lehet állapítani, hogy még ebben az igen precíz mérésben (az általunk meghatározott alakfaktor közel egy nagyságrenddel pontosabb, mint a zürichi csoport egyébként szintén pontos méréseiből kapott  $1,0 \pm 0,2$ ) sem jelentkezett a Koh által [57] jelzett helyen semmiféle anomália. Zon és Rapoport 1968-ban kísérleti eredményeinkkel egybehangzóan kimutatták [64, 65], hogy az anomália jelentkezése Koh és munkatársai számításaiban ezek közelítő jellegével magyarázható, pontosabb számítások szerint ilyen anomália nem várható. Hasonló információt kaptunk nemrégiben magától Kohtól is [66].

A  $^{36}\text{Cl}$  és  $^{55}\text{Fe}$  belső fékezési sugárzási spektrumára kapott alakfaktorok az eddig közölt legpontosabbak az irodalomban (különösen  $^{55}\text{Fe}$  esetében). Ezek pontos-

sága összehasonlítható, sőt jobb a béta-spektrum alak vizsgálatoknál elért pontossággal.

A  $^{55}\text{Fe}$  megengedett bomlásában ugyanakkor ennél a nagy pontosságnál is teljes az egyezés az elmélettel [58, 59, 65].

A  $^{36}\text{Cl}$  esetében a részletes elméleti analízist Zon és Rapoport [64] végezték el. Ők dolgozták ki különben a tiltott radiatív elektron befogás pontos és részletes

elméletét is. Eszerint Lipnik és munkatársainak adatai összeegyeztethetők az elmélettel, de a mi nagy pontosságú adataink és az elmélet között már határozott eltérés mutatkozik [64, 65]. Részben további számítások volnának hasznosak, részben pedig a mérések kiterjesztése a spektrum alacsonyabb energiájú tartományára is.

Méréseinkben meghatároztuk a  $^{36}\text{Cl}$ — $^{36}\text{S}$  teljes bomlási energiáját. Eredményünket más korábbi értékekkel összehasonlítva a 3. táblázat mutatja.

Látható, hogy a többi belső fékezési sugárzási spektrum vizsgálatából nyert adattal összehasonlítva, a jelen mérésekből kapott a legalacsonyabb és ez közelíti meg legjobban az atomi tömeg táblázatban adott teljes átmeneti energia értéket. Legújabban kimérték a pozitron spektrumot a  $^{36}\text{Cl}$  bomlásában [67] és ebből a mérésekből a teljes bomlási energiára  $1137 \pm 18$  keV adódott.

### 5. Az integrális belső fékezési sugárzási spektrum vizsgálata a $^{32}\text{P}$ béta-bomlásában

5.1. Bevezetés. Aston észlelte először a húszas évek végén [68], hogy a tiszta béta-sugárzó izotópok bomlását is kíséri kis intenzitású gammasugárzás és hogy ez folytonos energiaeloszlású. Kiderült, hogy az ún. külső fékezési sugárzáson kívül, amely akkor keletkezik, ha a magból kilépett részecske más mag elektrosztatikus terével kerül kölcsönhatásba, maga a béta-folyamat is lefolyhat úgy bizonyos valószínűséggel, hogy az átmenet energiája nemcsak az elektron és az antineutrínó között oszlik meg, hanem az elektron, az antineutrínó és egy gamma-kvantum között, azaz

$$n \rightarrow p + e + \bar{\nu} + \gamma.$$

## 3. TÁBLÁZAT

A  $^{36}\text{Cl}$ — $^{36}\text{S}$  átmenet teljes bomlási energiája

Szerző, év	Hivatkozás	Teljes bomlási energia, keV
Dougan et al., 1962	[50]	$1170 \pm 40$
Berényi, 1962	[51]	$1162 \pm 45$
Lipnik et al., 1964	[55]	$1178 \pm 15$
Jelen mérések, 1965	[48]	$1158 \pm 18$
Atomi tömeg táblázat 1965	[155]	$1135 \pm 9$



Ilyen folyamat a bomló mag elektromágneses terében hirtelen bekövetkezett változás következményeképpen fordulhat elő, pontosabban az elektromágneses kölcsönhatás perturbáló hatásának eredményeképpen a gyenge kölcsönhatás által kiváltott béta-bomlási folyamatban.

A harmincas évek közepén kidolgozták a béta-bomlást kísérő belső fékezési sugárzás (BFS) elméletét is [69, 70], amelyet azután többször tökéletesítettek, illetve tiltott átmenetekre általánosítottak [71–85].

A belső fékezési sugárzási folyamattal kapcsolatos problémák azonban mind-egyedül nem zárultak le. A kísérlet és az elmélet között különféle eltéréseket észleltek. Ezeket próbálták magyarázni Coulomb-effektusokkal [pl. 86], más magasabb rendű effektusok felléptével (virtuális állapotokon keresztül történő ún. „detour” átmenetek) [87], de a baj az, hogy maguk a kísérletek egymás között is a legkülönbözőbb eltéréseket mutatják, ahogy arra pl. legutóbb *Persson* a problémakörre vonatkozó kitérő áttekintésében rámutatott [88]. Így a kb. száz cikk ellenére, amely a jelenség elméleti vagy kísérleti vizsgálatával foglalkozik, a kérdést nem tekinthetjük tisztázottnak.

A belső fékezési sugárzásra vonatkozó ismereteink itt vázolt helyzete készített arra, hogy beható vizsgálatokat folytassunk ezzel a folyamattal kapcsolatban és megkíséreljük tisztázni az eddigi kutatások folyamán felmerült ellentmondásokat.

## 5.2. A mérési feltételek kritikai analízise

A belső fékezési sugárzási folyamat vizsgálatánál a kísérleti nehézségek kétségkívül igen nagyok.

1. Mindenek előtt a folyamat kis valószínűsége jelent problémát. Ennek megfelelően a kísérleteknél alacsony háttérre és hosszú mérési időkre van szükség. További nehézség ezzel kapcsolatban, hogy a spektrális eloszlásban az intenzitás az energiával rohamosan csökken, így az egész spektrum intenzitásában több nagyságrendet fog át.

2. Kétségkívül centrális probléma a különböző belső fékezési sugárzási mérésekben a külső fékezési sugárzás kiküszöbölése, amelyik a forrásból emittált elektronoktól ered. Ez utóbbiak intenzitása több nagyságrenddel múlja felül a vizsgálandó belső fékezési sugárzását.

3. A szisztematikus hibáknak komoly forrása lehet a kiértékelés is, amelynek folyamán egy egész sor jelentős korrekciót kell végrehajtani. Így elsősorban is a kísérleti szcintillációs spektrumból vissza kell állítani a valódi spektrumot (korrekció a kristály hatásfokára, a Compton-eloszlásra és a véges feloldóképességre), de korrekciót kell venni — vagy legalábbis megvizsgálni az effektus nagyságát az adott kísérleti körülmények között — pl. a gamma-abszorpcióra, a visszaszórásra, a jó K-röntgen csúcsára stb.

A továbbiakban a felsorolt három problémát tárgyaljuk részletesebben, külön alfejezetekben.

### 5.2.1. Kis háttér és nagy statisztikus pontosság

A három felsorolt fő probléma közül, amelyek a belső fékezési sugárzás vizsgálatánál jelentkeznek, az első látszik viszonylag legkönnyebben leküzdhető nehézségnek. A háttér csökkentésére megfelelő ólomvédelmet kell használnunk és növelnünk



kell a statisztikus pontosságot (különösen a spektrum nagy energiájú tartományában) egy elég erős forrás és egy elég hosszú mérési idő alkalmazásával.

Az egyes munkákban különböző vastagságú ólom védelemmel vették körül a NaI(Tl) kristályt. Az ólom vért 2 cm-es volt pl. [89] esetében, de 8 cm [90] és [91] munkákban és 10 cm [92]-nél. A koincidencia mérések esetében viszont, ahol a béta-részecskék és a megfelelő BFS-i kvantumok között mérnek koincidenciát, általában nem alkalmaznak a detektort körülvevő ólom védelmet a háttér csökkentésére.

A háttér konkrét értéke csak néhány esetben lett az egyes cikkekben számszerűen megadva (pl. a BFS intenzitásának 10%-a [90]-ben, 30%-a [91]-ben 1000 keV-nél és 15%-a 1200 keV-nél, [92] esetében), de a nagy háttérrel általában megfelelő hosszú mérésekkel (néhány órától néhány hét mérési idő) kompenzálták úgy, hogy az integrális mérésekben elért statisztikus pontosság általában jobb, mint 3% 1000 keV-nél, sőt még magasabb energiáknál is. A koincidencia mérések esetében ugyanebben az energiatartományban a statisztikus pontosság 10–15%.

A hosszú méréseknél igen fontos a berendezés stabilitása. A közölt adatok szerint a mérő rendszer kalibrációs változásai (instabilitás) a következő határok között voltak:  $\pm 0,5\%$  [93],  $\pm 1,0\%$  [94] [95],  $\pm 1,5\%$  [91]. Ugyanakkor meg kell jegyeznünk, hogy az észlelt eltéréseket ennél sokkal nagyobb instabilitással sem lehet magyarázni.

A források erőssége 100  $\mu\text{C}$ -tól [96] 100 mC-ig [97] változott. Az a tény, hogy vannak olyan esetek, amikor ugyanabban a mérésben igen eltérő, nagyságrenddel eltérő forrásokat is használtak [96], [92], [89] és eltéréseket a különböző forrással felvett spektrumok esetében sem tapasztaltak ([96]-nál pl. a legkisebb forrás 100  $\mu\text{C}$ , a legnagyobb 100 mC volt nagyságrendben), eleve kizárja azt a feltételezést, hogy az eltéréseket valamiféle impulzus szuperpozíció (pile-up) okozza, amely a nagy impulzusszám miatt lép fel.

Megállapíthatjuk tehát, hogy nem látszik valószínűnek, hogy az elmélet és kísérlet, valamint a különböző kísérletek közötti jelentős eltéréseket akár nagy háttér, akár a forrás erősség vagy a szükséges hosszú mérési idő alatt fellépő instabilitások okoznák. Az eltérés okát tehát máshol kell keresnünk.

### 5.2.2. A béta-elektronok és a külső fékezési sugárzás kiküszöbölése

Az egyik legnehezebb probléma a bétabomlásból eredő BFS kutatásában a béta-részecskék jelenléte, amely utóbbiaknak az intenzitása nagyságrendekkel múlja felül a vizsgálandó sugárzás intenzitását. A béta-részecskéket ugyan könnyű abszorbeálni, viszont az abszorpció külső fékezési sugárzás, KFS, fellépéséhez vezet, amely bár nagyságrendekkel kisebb intenzitású, mint az eredeti béta-sugárzás, de még mindig felülmúlhatja, sőt esetleg sokszorosán felülmúlhatja a BFS intenzitását kedvezőtlen körülmények között.

A forrásból eredő béta-részeztől való megszabadulásra lényegében három különböző típusú módszert alkalmaztak, éspedig a KFS detektálási térszögének a kibővítése a BFS-éhez képest („térszög transzformálási” módszer), a koincidencia módszer és a mágneses eltérítés.

A BFS spektrum tanulmányozásánál mágneses eltérítést csak két kutató alkalmazott eddig a forrásból kiinduló direkt elektronok kiküszöbölésére. Renard a  $^{32}\text{P}$  bomlásából eredő BFS legkisebb energiájú tartományát (3-tól 30 keV-ig) vizsgálta ezzel a módszerrel [98], míg *Langevin-Joliot* több nuklidot is vizsgált



[96, 99—101]. Az utóbbi szerző kapta különben a legnagyobb eltéréseket az elméleti spektrumtól a különböző izotópok esetében végzett valamennyi mérést tekintve (pl. a  $^{32}\text{P}$  BFS-nál 150 keV körül a kísérleti spektrumban jelentkező többlet nála mintegy 150%-os az elméleti eloszláshoz képest).

A koincidencia elrendezésénél a béta- és gamma-detektor között megfelelő ólom árnyékolást alkalmaznak. Így azok az elektronok, amelyek a gamma csatornában elhelyezett abszorbensben váltottak ki KFS-t, nem detektálódhatnak a béta-detektorban, viszont az itt detektálódott elektronok által keltett KFS nem juthat el a gamma-detektorba [93, 102]. A [95]-ben közölt hármaskoincidencia elrendezés is az e bekezdésben tárgyalt típusú mérésekhez tartozik, míg a [94]-ben közölt kettős koincidencia rendszer gyakorlatilag singles spektrumot eredményez, de kiküszöbölve a szcintillációs singles spektrumban egyébként mindig jelen levő Compton eloszlást.

A leggyakrabban alkalmazott módszer a forrásból jövő elektronok kiküszöbölésére az, hogy egy alacsony rendszámú abszorbenst helyeznek el a forrás és a detektor között egy ólom kollimátor elé (az elrendezés vázlatát a 10. ábra mutatja). Ha itt a viszonylag vastag abszorbensben keletkezett KFS szögeloszlását izotrópnak tételezzük fel, akkor könnyen belátható, hogy az abszorbens megfelelő elhelyezésénél a detektorba érkező KFS lényegesen lecsökken a BFS-hez képest, ugyanis a keletkező KFS a  $4\pi$  térszögbe lép ki (eredetileg az abszorbensre érkező elektronsugárzás és BFS térszöge kb. egyenlő, ezért lehet a módszert transzformálási módszernek nevezni).

A továbbiakban a legutóbbi módszerrel részletesebben is szeretnénk foglalkozni, mivel egyrészt a BFS-i spektrumra vonatkozó mérések zömét ezzel végezték, másrészt ennek a segítségével széles energiatartományban jó statisztikát lehet elérni reális mérési idő alatt.

A szóban forgó elrendezésnél a feladat az, hogy úgy válasszuk meg a feltételeket, hogy a KFS intenzitásának a BFS-éhoz való viszonya minimális legyen. Ha

$$N_{\text{BFS}}(E_\gamma) = N_0 f_{\text{BFS}}(E_\gamma) \omega_{\text{BFS}}$$

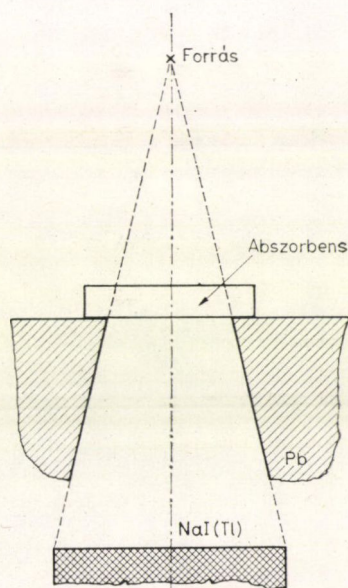
$$N_{\text{KFS}}(E_\gamma) = N_0 f_{\text{KFS}}(E_\gamma, Z_{\text{absz}}) \omega_\beta \omega_{\text{KFS}},$$

akkor

$$\frac{N_{\text{KFS}}(E_\gamma)}{N_{\text{BFS}}(E_\gamma)} = \frac{f_{\text{KFS}}(E_\gamma, Z_{\text{absz}})}{f_{\text{BFS}}(E_\gamma)} \frac{\omega_\beta}{\omega_{\text{BFS}}} \omega_{\text{KFS}}$$

ahol  $N_{\text{BFS}}$  és  $N_{\text{KFS}}$  a BFS-től, illetve a KFS-től eredő impulzusszámok,  $N_0$  az időegység alatt kibocsátott béta-részecskék száma,  $f_{\text{BFS}}$  és  $f_{\text{KFS}}$  a BFS, illetve a KFS emissziójának valószínűsége béta-részecskénként (feltételezve a béta-részek teljes abszorpcióját), az  $\omega$ -k pedig a megfelelő térszögek (lásd a 11. ábrát).

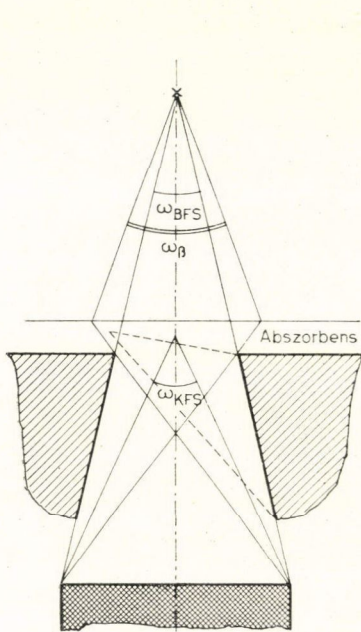
Az  $f_{\text{KFS}}/f_{\text{BFS}}$  viszony első közelítésben nem függ a geometriai elrendezéstől (nem tekintve a KFS anizotróp komponenseit, amelyek nagyobb energiáknál már



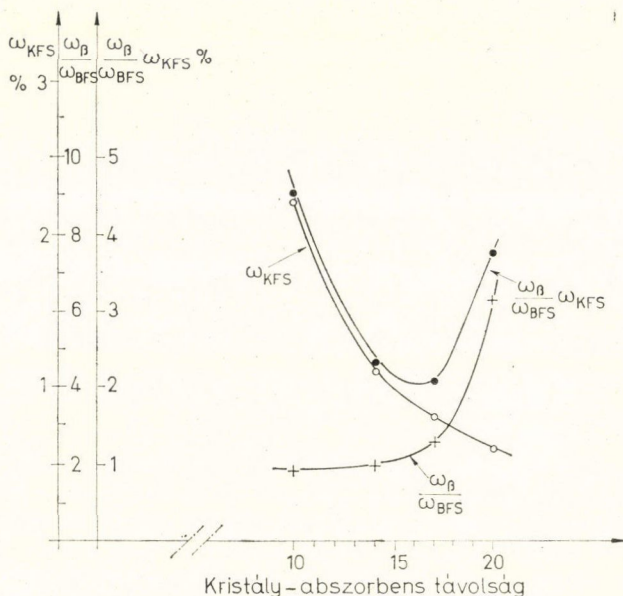
10. ábra. Mérési elrendezés vázlatát az integrális BFS-i spektrum vizsgálatánál



adhatnak kisebb szög-függő járulékok). Így a  $N_{KFS}/N_{BFS}$  viszony geometriai függése a három  $\omega$ -tól ered. Ez utóbbiak sík ekvivalensei láthatók a 11. ábrán. Az  $\omega_\beta/\omega_{BFS}$  mindig nagyobb mint egy (lásd az ábrát) és pedig annál nagyobb, minél közelebb van az abszorbens a forráshoz egy adott detektor—forrás távolságnál. Ugyanakkor az  $\omega_{KFS}$  monoton csökken az abszorbens-forrás távolság csökkenésével, azaz ahogy az abszorbens egyre távolabb kerül a detektortól. Így  $\left(\frac{\omega_\beta}{\omega_{BFS}} \omega_{KFS}\right)$ -ra kell legyen



11. ábra. A BFS mérésnél fellépő szögek síkbeli ekvivalensei



12. ábra. A térszögek és kombinációik változása a kristály—abszorbens távolság függvényében (22,5 cm kristály—detektor távolságánál,  $6,3 \times 5,1$  cm kristálméretnél és 1 cm abszorbens vastagságnál)

egy minimum az abszorbens forrás és detektor közötti elhelyezkedéstől függően. A 12. ábrán a fenti térszögeknek és kombinációiknak változását láthatjuk 22,5 cm forrás- és detektor-távolság és  $6,3 \times 5,1$  cm kristálméret, valamint 1 cm-es abszorbens-vastagság esetén a kristály és abszorbens közötti távolság függvényében.

Már ezekből a közelítő geometriai megfontolásokból is látható, hogy az  $\omega_\beta/\omega_{BFS}$  viszony nagyon lassan változik a kristály—abszorbens távolsággal (adott kristály—forrás távolságnál), kivéve, ha az abszorbens a forrás közvetlen közelében van. Az  $\omega_{KFS}$  viszont éppen ellenkezőleg meglehetősen erősen csökken, amint a kristály—abszorbens távolság nő és ez a változás csak a forrás közelében (nagy kristály-abszorbens távolság) lassul le. Az derül ki tehát, hogy adott detektornál egy elég nagy detektor—forrás távolságot kell választanunk (amelynél KFS relatív hozzájárulása a kívánt érték alá csökken és az így fixált kristály—forras távolságnál pedig az abszorbenst lehetőleg messze — tehát nem a távolság felénél! — kell elhelyeznünk



a detektortól). A 12. ábra esetében pl. 16–17 cm detektor-abszorbens távolságnál kapunk minimumot az  $\left(\frac{\omega_{\beta}}{\omega_{\text{BFS}}}\right) \omega_{\text{KFS}}$  kifejezésre.

A valóságban azonban  $\omega_{\beta}$  nagyobb, mint ahogy azt a 11. ábrán jeleztük és eddigi megfontolásainkban figyelembe vettük. A 13. ábra mutatja, hogy a KFS sokkal nagyobb térfogattól juthat direkte és indirekte a detektorba, mint az a pusztán geometriai viszonyokból következne. 2 cm vastag ólom pl. az eredeti gamma sugár-intenzitás kb. 1/4-ét változtatlanul átengedi 1 MeV energiánál és még további részét energiacsökkenéssel. Az  $\omega_{\beta}$  és  $\omega_{\beta'}$ -nek megfelelő térszögek viszonya pl. körülbelül 5 a 12. ábrának megfelelő geometriánál.

Ugyanakkor a KFS szórása is meglehetősen nagy lehet a kollimátor falairól, különösen „rossz” geometriánál, ahol az abszorbens és a kristály relatíve közel vannak egymáshoz (azaz  $\omega_{\text{KFS}}$  nem elég nagy).

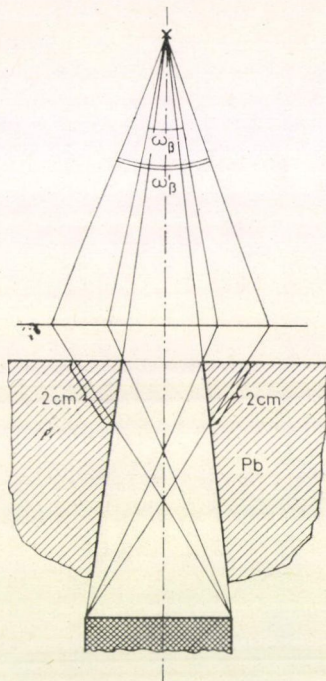
A már említett penetrációs effektus a kollimátor peremén (13. ábra) módosítja ugyan az abszorbens optimális helyét (12. ábra), de ez a kristály felé tolódás nem jelentős, mivel az  $\omega_{\text{KFS}}$  nagysága egyre erősebben változik az abszorbens elhelyezkedésének függvényében, az abszorbenssel a detektor felé haladva.

Említsük meg végül az  $f_{\text{KFS}}/f_{\text{BFS}}$  hányados szerepét a KFS relatív nagyságára (lásd a fentebbi formulát). A szóban forgó hányados függvénye az energiának is, de legerősebben a rendszámától függ. Már közepes rendszámoknál is elérheti, sőt meg is haladhatja értéke a 10-et, de még plexi abszorbens esetében is van olyan energiatartomány, ahol nagyobb, mint 1, más energiáknál viszont egynél kisebb (lásd a 25. ábrát).

Meg kell még itt jegyeznünk azt is, hogy a KFS szögeloszlása az ezekben a mérésekben alkalmazott viszonylag vastag abszorbensek esetén sem teljesen izotróp [90]. Így a KFS anizotrópiája is növeli a KFS relatív hozzájárulását és ez annál nagyobb, minél közelebb van az abszorbens a detektorhoz.

Azt mondhatjuk tehát, hogy a KFS relatív hozzájárulása a BFS spektrumhoz néhány %-tól néhányszor 10%-ig terjedhet, függően a tényleges geometriától, egy adott geometriánál pedig függ az energiától is (lásd a geometriai elrendezés hatásának kísérleti vizsgálatát később). És ami még figyelemreméltóbb tény, hogy a KFS-i hozzájárulás nem tűnik el teljesen akkor sem, ha  $Z=0$  extrapolációt végzünk és ez a maradvány annál nagyobb, minél rosszabb geometriánál folytat a mérések. Ez következik eddigi megfontolásainkból (lásd az abszorbens vastagság hatását: 11. ábra és a penetrációt a kollimátor szélein: 13. ábra stb., pl. az abszorbens  $Z$ -jének pontatlan ismeretét), de kísérletileg is ki fogjuk mutatni a későbbiekben.

Mindezek alapján világos az is, hogy miért olyan hátrányos a henger alakú kollimátor használata, amelyet különösen korábban általánosan alkalmaztak



13. ábra. A gamma-sugarak áthaltnak az ólom kollimátor peremén és ez befolyásolja  $\omega$  nagyságát



[pl. 90, 92 stb.]. Itt nemcsak a szórás nagyobb, de nagy a különbség az  $\omega_{\text{BFS}}$  (amelyet a kollimátor kristály felé eső része vagy maga a kristály felülete határoz meg) és az  $\omega_{\beta}$  között (amelyet viszont a kollimátor forrás felé eső része definiál). Ebben az esetben meglehetősen intenzív KFS jelenik meg gyakorlatilag a spektrum egészében.

### 5.2.3. A mért impulzuseloszlás korrigálása

Áttekintve valamennyi korrekciót, amelyet a különböző szerzők végeztek a BFS mérésénél, éspedig a korrekciót a Compton-eloszlásra, a jó  $K$  röntgen-sugárzásának megszökésére, a visszaszórásra, a fotocsúcs hatásfokra, a véges energia feloldásra, az impulzus szuperponálódásra, a forrás vastagságra, a gamma-abszorpcióra, továbbá koincidencia mérésekben még a véletlen koincidenциákra, a béta-abszorpcióra és a koincidencia kör hatásfokára is, megállapíthatjuk, hogy ezek közül a legnagyobb a fothatásfok korrekció. Ezért először ezzel szeretnénk foglalkozni.

A legtöbb esetben a *fotocsúcs hatásfok korrekciót* számításokon alapulva végezték. Vagy a gamma-sugárzás abszorpciós koefficiensére vonatkozó táblázatokat [mint 103] felhasználva számították ki a teljes detektálási hatásfokot ( $\epsilon_t$ ) vagy mindjárt számított  $\epsilon_t$ -ket tartalmazó táblázatokat [mint 104] használtak. Szcintillációs gamma-detektorok teljes detektálási hatásfokának számítása közismerten sok nehézséggel jár. Problémát jelentenek itt nemcsak a tényleges geometriai feltételek (forrásméret, kollimálás, szórások, a konkrét környezet), de — különösen nagyobb energiáknál — a kettős, hármas stb. Compton-folyamatok figyelembe vétele a kristályon belüli abszorpciónál.

A teljes detektálási hatásfok ismeretében a fotocsúcs hatásfok a következő összefüggésből adódik

$$\epsilon_p(E_\gamma) = R(E_\gamma)\epsilon_t(E_\gamma),$$

ahol az  $R(E_\gamma)$ , a fotocsúcs teljes spektrum alatti terület viszonya, a BFS mérésekben általában kísérletileg, a konkrét mérési körülmények között lett meghatározva. Így könnyen előfordulhat, hogy  $R$  mért értékei kisebbek az „ideális” értéknél, ugyanis a különböző szórások elsősorban a szcintillációs spektrum Compton-tartományát növelik meg, a fotocsúcsot gyakorlatilag változatlanul hagyják. Ugyanezen effektusok miatt az  $\epsilon_t$  számított értéke kisebb lehet, mint a valóságos érték. Végeredményben tehát ezzel a módszerrel a ténylegesnél kisebb  $\epsilon_p$  értékeket kaphatunk, ami az ezekkel történő korrekciónál a kísérleti spektrum megemeléséhez vezethet az elméletivel összehasonlítva. Minél rosszabb a mérési geometria a szórások szempontjából, azaz minél nagyobb a Compton-eloszlás magassága a fotocsúcsához viszonyítva, annál nagyobb lehet az így elkövetett hiba. Ugyancsak nagyobb az ilyen jellegű hibák lehetősége kisebb kristályoknál vagy nagyobb energiáknál, ahol nő a Compton-eloszlás jelentősége a fotocsúcsához (teljes energia-csúcsához) viszonyítva. Egy további, ugyancsak energia függő eltérés eredhet itt még a térszög faktor számításából is.

A fotocsúcs hatásfok korrekció hibáját legújabban 10% nagyságrendűre becsülték [91], ami a fenti megfontolásaink alapján is igen reális becslésnek látszik, hozzátevé, hogy az energia növekedtével nő az ettől a korrekciótól eredő hibák lehetősége.

A kísérleti adatok korrigálásánál ugyancsak jelentős szerepet játszik az ún. *Compton-korrekció*, amely a szcintillációs spektrumban mindig jelentkező Compton-



eloszlás miatt végzendő el, amikor a kísérleti és elméleti spektrumot össze akarjuk hasonlítani. Nyilvánvaló, hogy ha a geometriai elrendezés rossz a szórások szempontjából és így a Compton-eloszlás magas a fotocsúcshoz viszonyítva, a Compton korrekció értéke nagyobb lesz és jelentősebb lehet a tőle eredő hiba is a korrigált adatoknál. Az irodalomban pl. van olyan eset, hogy a Compton-eloszlás kisebb, mint egy nyolcada a fotocsúcs magasságának [89], de általában ez a hányados egy negyed [105], egy harmad [91], sőt van olyan kirívó eset is, amikor a Compton-eloszlás magassága a visszaszórási csúccsal együtt majdnem kétszerese a fotocsúcénak [96] a  $^{137}\text{Cs}$  szcintillációs gamma-spektrumában.

További problémát jelenthet és szisztematikus hibákra vezethet a *detektor véges feloldóképessége* miatt fellépő korrekció. A közlemények alapján a helyzet ezzel kapcsolatban elég ellentmondásosnak látszik. Mindenesetre a korrekció értéke a legszámottevőbb kell, hogy legyen a nagyobb energiáknál, a BFS-i spektrumok végső harmadában (nem tekintve a legkisebb energiájú tartományt 40–50 keV alatt), részben a monoenergetikus vonalak energiával növekedő abszolút félértékszélessége miatt, részben a BFS-i spektrum gyors változása következtében ebben a tartományban (pl. a  $^{32}\text{P}$ -nál 1000–1200 keV-től a magasabb energiák felé).

Mindez mutatja ennek a korrekciónak a fontosságát éppen azon eltérések szempontjából, amelyeket a szerzők egy része észlelt az elméleti BFS-i spektrumhoz viszonyítva a spektrumok nagyobb energiájú tartományában, a maximális energia közelében levő harmadában [88].

Sok dolgozatban [pl. 90, 92, 94, 95, 91] a véges feloldásra *Lidén és Starfelt* módszerével [90, 106] korrigáltak. Erről a módszerről azonban időközben kiderült, hogy hibás [107], egy kettes faktorról kisebb korrekciós értéket szolgáltat, mint az *Owen—Primakoff* eljárás [108], amely a probléma integrál egyenletének egyik lehetséges parciális megoldásából adódik. A kísérleti adatok korrigálásánál ez a korrekció negatív, csökkenti a kísérleti eloszlást, tehát ha értéke kisebb a valóságnál, kísérleti többletthez vezethet (éspedig leginkább éppen a nagyobb energiájú tartományban) az elméleti és kísérleti spektrum összehasonlításánál. A numerikus értékeket tekintve pl. ha az *Owen—Primakoff* korrekció 16–17% ad egy konkrét esetben (BFS a  $^{32}\text{P}$  bomlásában 1450 keV-nál, lásd a 23. ábrát), *Lidén—Starfelt* értéke itt csak ~8%.

A *Palmer—Laslett* eljárás [109] szintén egy helyes parciális megoldáson alapul, egy elfogadható közelítést jelent a korrigálásra. Ez általában kisebb korrekciós értéket ad az előző eljáráshoz képest (ott ahol egyébként is kicsi, sőt elhanyagolható a korrekció), a nagyobb energiákra viszont ez a módszer már gyakorlatilag ugyanazt az eredményt adja, mint *Owen és Primakoff* eljárása.

A helyzetet kísérleti oldalról az bonyolítja és teszi ellentmondásossá, hogy *Hakeem és Goodrich* [89] megmérte a BFS-i spektrumot a  $^{32}\text{P}$  bomlásában 8,5 és 13% feloldású detektorral is, és a kapott eredményeket nemcsak egymással, de az elméleti spektrummal is megegyezőnek találták, még a legnagyobb energiáknál is. Ez az eredmény az ettől az effektustól eredő egész korrekció elhanyagolhatóságára utal. Ugyancsak figyelemre méltó, hogy *Narasimhamurty és Janananda* [91], bár a *Lidén és Starfelt*, tehát a hibás korrekciót alkalmazták, a nagyobb energiájú tartományban a  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektrumánál ők se találtak eltérést az elméleti eloszlástól.

Úgy látszik, hogy a feloldási korrekcióval kapcsolatos problémák tisztázására további részletesebb kísérleti és matematikai vizsgálatokra volna szükség.

A BFS-i spektrum tanulmányozásában az abszolút mérésekben (tehát amikor nemcsak a spektrum alakot tanulmányozzuk) általában jelentős hibával jár a *forrás*



*abszolút aktivitásának meghatározása.* Egy legutóbbi mérésben például ez adta a döntő hozzájárulást a végeredmény megadott hibájához, amely 25% volt [110]. A BFS-i spektrum alakjának vizsgálatához azonban nem szükséges a forrás abszolút aktivitásának az ismerete.

#### 5.2.4. Konklúziók a mérési feltételekre vonatkozólag

Az eddigi fejtegetések alapján az látszik legvalószínűbbnek, hogy a BFS spektrum torzulásai a külső fékezési sugárzás hozzájárulásából és a fotocsúcs korrekció lehetséges hibájából adódnak. Ugyancsak hozzájárulhat még az eltérésekhez a fentiek szerint a Compton- és a feloldási korrekció is.

A KFS széles tartományban okozhatja a kísérleti adatok megnövekedését (a spektrum maximális energiájához viszonyítva, legkisebb energiáktól a közepeseken keresztül a legnagyobbakig, mégis a legvalószínűbben a kisebb és a közepes energiáknál ad nagyobb hozzájárulást), ugyanígy a fotocsúcshatások is, de a szisztematikus hibák ez utóbbinál valószínűbbek a nagyobb energiáknál. A Compton- és a feloldási korrekció szerepét tekintve, az előbbi inkább a kisebb és közepes, míg az utóbbi a nagyobb energiáknál okozhat szisztematikus eltéréseket.

### 5.3. Kísérleti vizsgálat a $^{32}\text{P}$ belső fékezési sugárzására vonatkozólag

#### 5.3.1. Célkritizálás

Bár a  $^{32}\text{P}$  béta-bomlásában a feltűnően magas a log ft érték (7,9, [113]), azonban a legújabb vizsgálatok [114–116] megbízhatóan tisztázták, hogy a béta-spektrum alakja a megengedett és a BFS-t tekintve pedig ez az a BFS-i spektrum, amelyre vonatkozóan a legtöbb vizsgálatot végezték eddig.

A  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektrumára vonatkozó cikkek száma tízen felül van. A maximális energiája ugyanis elég nagy ahhoz (1711 keV [117]), hogy az elmélet helyességét nagyobb energiáknál is ellenőrizni lehessen, ugyanakkor felezési ideje (14,5 nap [117]) alkalmassá teszi pontosabb mérések elvégzésére is. Mindezek ellenére a  $^{32}\text{P}$  BFS esetében is igen ellentmondásos a helyzet. Nemcsak az elmélet és a kísérlet között észleltek eltéréseket, hanem az egyes kísérleti spektrumok egymásnak is ellentmondó eltéréseket mutatnak (lásd részletesebben a későbbiekben).

Ezért határoztuk el a vonatkozó irodalom, valamint a mérési feltételek és a kiértékelési eljárás kritikai analízise alapján (lásd az előző 5.2. fejezetben) egy újabb, precíz kísérlet végrehajtását a  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektrumra vonatkozólag. [111, 112].

#### 5.3.2. Irodalmi áttekintés

A szcintillációs számlálók alkalmazásával végzett első kísérletekben csak a BFS-i sugárzási spektrum alacsony energiájú tartományát vizsgálták a  $^{32}\text{P}$  bomlásában [118–121]. Ezek közül csak *Bolghiano* és munkatársai [120] találtak egyezést a *Knipp*, *Uhlenbeck* [69] és *Bloch* [70] elmélettel (ez az ún. KUB elmélet) a 30-tól 120 keV-ig terjedő energia tartományban. A másik három munkában [118, 119, 121] a kísérleti értékek általában magasabbak az elméletiekénél (egészen 50%-ig terjedően).

Mint már említettük, továbbá *Renard* [98] a spektrum legalacsonyabb energiájú tartományát vizsgálta 3-tól 30 keV-ig egy proporcionális számlálót mágneses térrel



kombinálva. *Renard* a vizsgált tartományban jó egyezést talált az elméleti eloszlással, de utóbb kiderült, hogy az általa használt elméleti értékek lényegesen a más szerzők által használtak alatt helyezkedtek el [90].

A következő években azután kiterjesztették a BFS-i spektrum vizsgálatát a  $^{32}\text{P}$ -nál egészen 1 MeV-ig, sőt a felé és nemcsak integrális, de differenciális méréseket is végeztek, azaz felvették a BFS-i spektrumot koincidenzában a meghatározott energiájú, illetve a BFS-i kvantumok emittálási (detektálási) irányához képest meghatározott szögben kibocsátott elektronokkal. Ezekben a munkákban részben egyezést találtak [97, 102, 122, 123, 89, 93] a *Nilsson* által korrigált KUB elmélettel [69, 70, 73, 74] a tanulmányozott tartományban, részben különféle, jórészt egymásnak ellentmondó eltéréseket tapasztaltak [106, 96, 92, 94, 95, 91, 110]. Például *Lidén* és *Starfelt* [90], majd *Langevin-Joliot* [96] eltérést találtak gyakorlatilag az egész spektrumban egészen 1000 keV-on felül, az ő kísérleti spektrumaik az elméletihez képest jelentős többletet mutatnak. Míg azonban ez a pozitív eltérés *Lidén* és *Starfelt*-nél az energiával növekedő tendenciát mutat és kb. 60% 1 MeV-nál, *Langevin-Joliot*-nál a kísérleti többlet kb. 150% 150 keV-nál, de 1 MeV-nál már csak ~85% és ez is tovább csökken az energia növekedtével. Érdekes továbbá, hogy míg *Korotkov* és munkatársai első munkájában [92] az észlelt eltérés természete hasonló a *Lidén* és *Starfelt* által észlelthez, addig egyik későbbi munkájukban [95] az eltérés már csak 900 keV-tól felfelé jelentkezik.

A két legutóbb publikált mérésben a  $^{32}\text{P}$  BFS-ára vonatkozólag [91, 110, 124] ugyancsak eltérést találtak az elméleti és kísérleti spektrumok között, de az eltérések jellege teljesen különböző a két esetben. *Narasimhamurty* és *Janananda* [91] szerint a kísérleti pontok az elméleti spektrum felett fekszenek 100-tól 800 keV-ig (a maximális eltérés kb. 40—50% 650 keV-nál), viszont 800 keV-től felfelé egészen kb. 1200 keV-ig egyezés van a kísérlet és az elmélet között. *Kreische* és munkatársai [110, 124] ugyanakkor az energiával monoton növekvő eltérést állapítottak meg, amely a hibahatáron kívül kb. 800 keV-nál kezdődik és 1200 keV-nál pl. már 100 %.

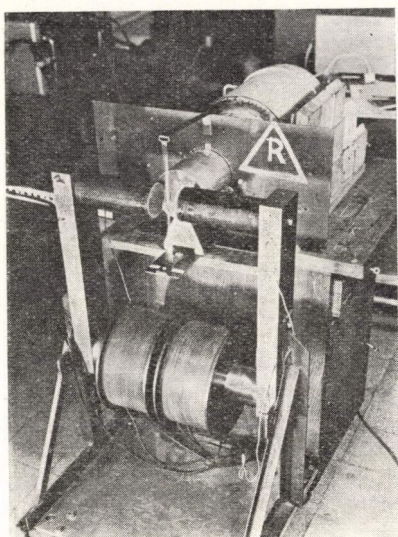
### 5.3.3 Kísérleti elrendezés és terv a mérések kiértékelésére

Hogy elkerüljük a lehetséges hibaforrásokat (lásd az előzőekben) a  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektrumának a vizsgálatánál, a mérési feltételeket és a kiértékelési eljárást a következőképpen választottuk meg.

Először is az integrális BFS-i spektrumot tanulmányoztuk a 5.2. pontnak megfelelően kialakított jó geometriai elrendezésnél. Ugyanakkor lehetővé tettük, hogy a forrásból jövő elektronok ugyanabban az elrendezésben nemcsak abszorbenssel legyenek eltávolíthatók, hanem mágneses tér alkalmazásával is. Így lehetőség nyílt arra, hogy ugyanabban a mérésben hasonlíthassuk össze az általában használt „térzőg transzformációs” módszerrel kapott eredményeket, a mágneses eltéréssel kapottakkal. A mágneses tér felhasználásával végzett mérés egyben kontrollt jelent *Langevin-Joliot* mérése [96] számára, aki egyedül alkalmazta eddig a mágneses eltérítési módszert a BFS-i spektrum széles tartományának vizsgálatában és eddig a legnagyobb pozitív eltéréseket észlelte az elméleti spektrumhoz viszonyítva. Saját kísérleti elrendezésünk fényképe, illetve keresztmetszete a 14. és 15. ábrán látható.

A fotocsúcs hatásfokot, amelyik a már kifejtettek szerint szintén problematikus pontja a kiértékelési eljárásnak, kísérletileg határoztuk meg a Bécsi Atomenergia Ügynökség által kibocsátott gamma standard sorozat segítségével. Ennél a hiba

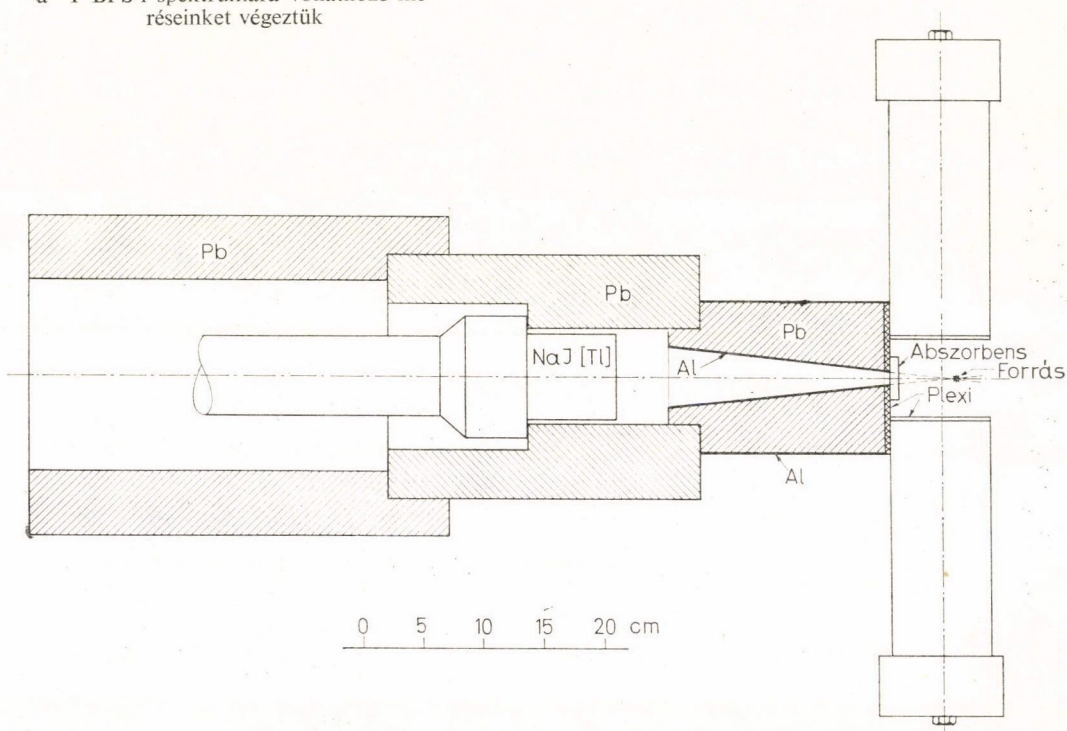




14. ábra. A berendezés fényképe, amellyel a  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektrumára vonatkozó méréseinket végeztük

a források abszolút aktivitásában részben 1, részben 2 és 3%. Így a hatásfok görbét 600 keV alatt 6% és 600 keV felett 3% pontossággal tudtuk meghatározni.

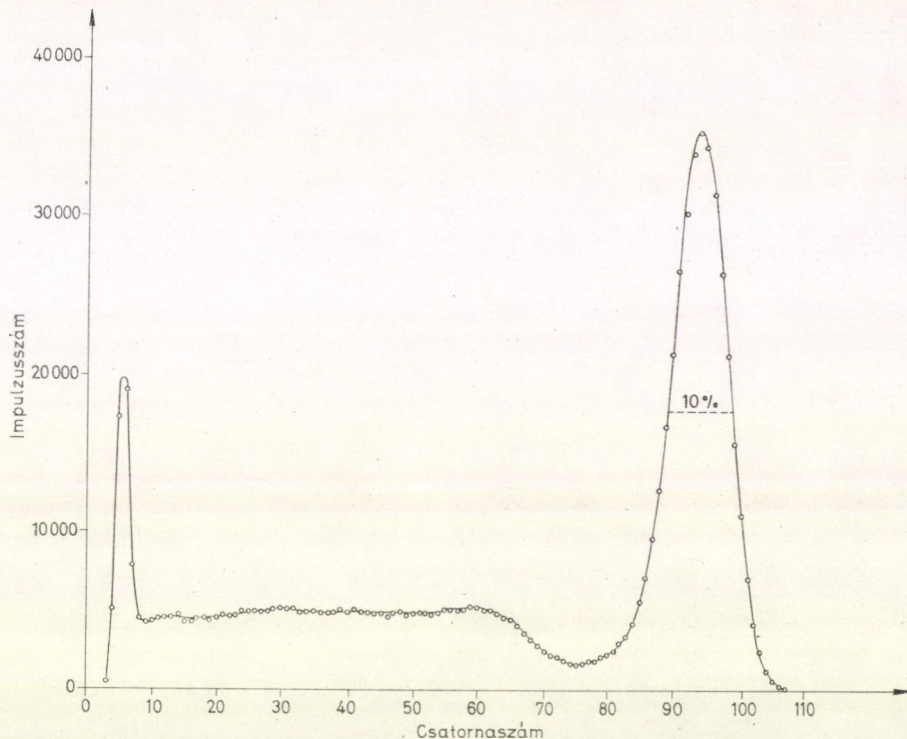
A  $^{137}\text{Cs}$  standard forrás berendezésünkkel felvett spektrumát a 16. és a fotocsúcs hatásfok görbét a 17. ábrán mutatjuk be. Amint az ábrán is látható, két hatásfok görbét határoztunk meg, egyiket úgy, hogy a kollimátor nyílása elé egy 7 mm-es plexi abszorbenst helyeztünk (mint a „térzőg transzformálással” végzett BFS-i spektrum vizsgálatokban) és a másikat anélkül. A hatásfok görbe felvételénél a bécsi ügynökségi standardokon kívül segítségükkel bemért másodlagos standardokat is alkalmaztunk. Ez utóbbiaknál a szekunder források aktivitását a standardokkal felvett totál hatásfok görbéből határoztuk meg és ebből a kísérleti csúcs-totál viszony felhasználásával adódott a fotocsúcs hatásfok.



15. ábra. A 14. ábrán látható berendezés keresztmetszete



A kiértékelési eljárásban, amelyet egy ODRA 1013 számítógép segítségével végeztünk, a kísérleti impulzus spektrumból csak a háttérrel vontuk le, minden más korrekciót az elméleti spektrumra alkalmaztunk. Az elméleti spektrumot a KUB elmélet [69, 70] szerint vettük, a mag Coulomb-terére Nilsson szerint korrigálva [73]. Az elméleti foton eloszlás impulzus eloszlássá alakítása és nem fordítva, több szem-

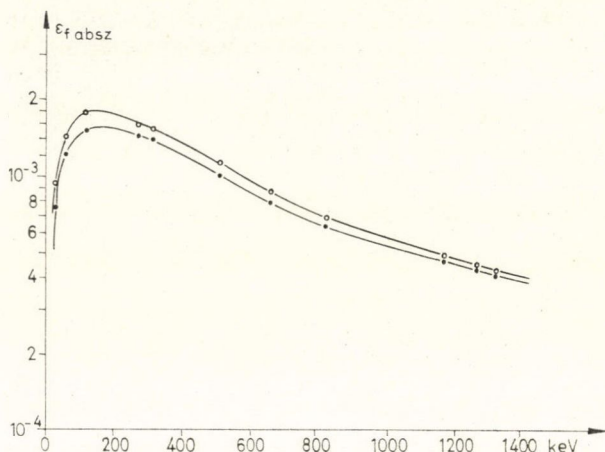


16. ábra. A  $^{137}\text{Cs}$  gamma-spektruma (662 keV) a 14. és 15. ábrán látható berendezéssel felvéve

pontból is előnyösnek látszik. Így pl. az elméleti spektrumban nincsenek statisztikus hibák, amelyek különösen a spektrum vége felé már zavaróak lehetnek (feloldási korrekciónál, Compton-korrekciónál). Nincs szükség továbbá kiegészítő Compton-korrekcióra, hogy a spektrum kísérletileg nem vizsgált nagyobb energiájú tartományának hatását a már vizsgált tartományra (amely éppen a Compton-eloszláson keresztül jelentkezik), figyelembe vegyük.

A kiértékelés menete különben a következő volt. Az egyes csatornáknak megfelelő elméleti értékeket először is megszoroztuk a megfelelő fothatásfokkal, azután a Compton-eloszlásra korrigáltunk, végül a feloldási korrekciót hajtottuk végre Owen és Primakoff szerint [108]. A Compton-korrekciónál rendre szummáztuk a magasabb csatornáktól eredő hozzájárulásokat és az egyes csatornáknál ezeket hozzáadtuk a Compton-korrigálatlan értékhez. A Compton-eloszlás magasságát és a Compton-él elhelyezkedését a csatornaszám függvényében kísérletileg határoztuk meg a standard spektrumok alapján.





17. ábra. Fotocsúcs hatásfok 7 mm plexi abszorbensen a kollimátor nyílása előtt (◐) és anélkül (○)

rási csúcs a szcintillációs spektrumban elhanyagolható hozzájárulásokat adnak az elvégzett korrekciókhoz képest.

Meg kell említenünk végül, hogy a jelen mérésben a  $^{32}\text{P}$  forrás abszolút aktivitása nem lett meghatározva. A kísérleti és elméleti spektrum alakját illesztéssel hasonlítottuk össze. Ez a BFS-i spektrum alakjának tanulmányozása szempontjából nem jelent hátrányt, viszont kiküszöböli azt a sokszor igen jelentős hibát, amelyet a forrás abszolút aktivitásának meghatározása hozhat be a spektrum alak vizsgálatokba is.

#### 5.3.4. További kísérleti részletek

Kísérleti elrendezésünk a 15. ábrán látható. A  $65\varnothing \times 65$  mm méretű NaI(Tl) kristály egy DuMont 6363 multiplierhez csatlakozott. Az impulzus eloszlást egy TMC—200 sokcsatornás analízátorral regisztráltuk.

A  $^{32}\text{P}$  forrás erőssége a mérések alatt átlagosan kb. 0,5 mC volt és a vastagsága  $\approx 1$  mg/cm<sup>3</sup>. A hordozómentes  $^{32}\text{P}$  készítményt az IZOCOMMERZ GMBH szállította az NDK-ből. A forrás hátlapjául egy néhány mg/cm<sup>3</sup> vastagságú cellulux fólia szolgált úgy, hogy semmiféle szilárd anyagból készült forrástartóra nem volt szükség (lásd a 14. ábrát). A  $\approx 3$  mm átmérőjű forrás folt kb. 1 mg/cm<sup>3</sup> vastagságú hostaphan fóliával volt letakarva.

#### 5.3.5. Mérések és eredmények

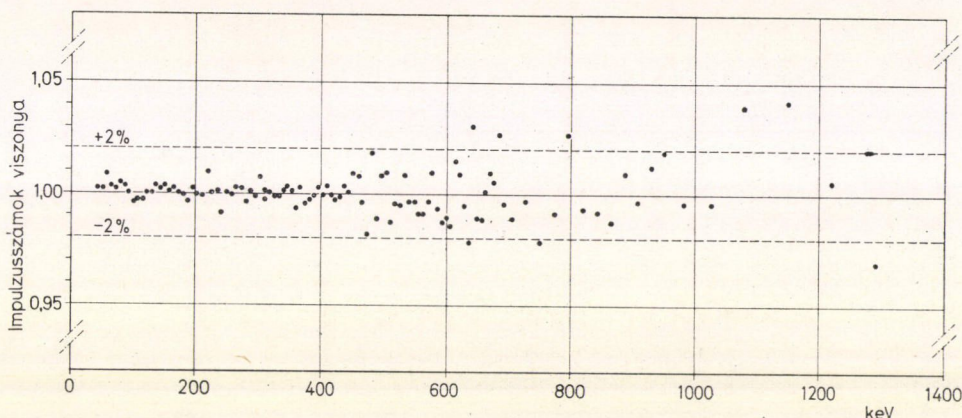
Az egyes mérési sorozatokon belül a  $^{32}\text{P}$ -ből eredő BFS sugárzás által kiváltott impulzus eloszlást mindenek előtt úgy mértük, egy 7 mm-es plexi abszorbenst helyeztünk el a kollimátor nyílása előtt és ugyanakkor eltávolítottuk (leszereltük) a mágneses pofákat (a „klasszikus” elrendezést valósítottuk meg). Ugyanezt a mérést elvégeztük úgy is, hogy a pofák jelen voltak, de mágneses tér nem volt (az elektromos gerjesztést nem kapcsoltuk be). Végül mértük az impulzus eloszlást mágneses térben

A mi fotocsúcs korrekciónk magában foglalta a gamma abszorpciós korrekciót is, a kristály burkolatában, illetve az abszorbensben a kollimátor előtt (amikor azt használtuk), mert a fothatásfok meghatározása a standardok segítségével az említett abszorbeáló anyagok jelenlétében történt. Hasonlóan ez a korrekciós eljárás részben korrigál a jód K röntgensugárzásának megszökésére is.

Az impulzus szuperpozíció, a forrás vastagsága, a röntgen megszökési korrekció előbbieken nem korrigált része, valamint a visszaszó-



(1150 Gauss), egyszer abszorbenssel a kollimátor nyílás előtt, egyszer anélkül (előzőleg ellenőriztük a mágneses tér hatását a multiplierre és kiküszöböltük a jelentkező zavaró effektusokat). Ugyancsak mértük minden sorozatban a háttérrel és ellenőriztük a hitelesítést. A kiértékelt sorozatokban az eltolódás a hitelesítésben  $\pm 0,5$  százalékos határon belül volt. A sorozatok különben megkettőzöttek voltak. Miután elvégeztük a most felsorolt méréseket, mindjárt megismételtük őket ellenkező sorrendben, hogy kompenzáljunk a forrás bomlására. A két különböző sorrendben végzett mérések együttese tett ki egy sorozatot.



18. ábra. Az impulzusszámok hányadosa, amelyeket a mágneses pofák jelenlétében és azokat eltávolítva vettünk fel. Egyébként mindkét esetben a kollimátor nyílása előtt 7 mm-es plexi abszorbens volt, tehát a mérés az integrális BFS-i spektrum mérésekben szokásos, „klasszikus” elrendezésben folyt (mágneses tér akkor sem lett alkalmazva, amikor a pofák jelen voltak)

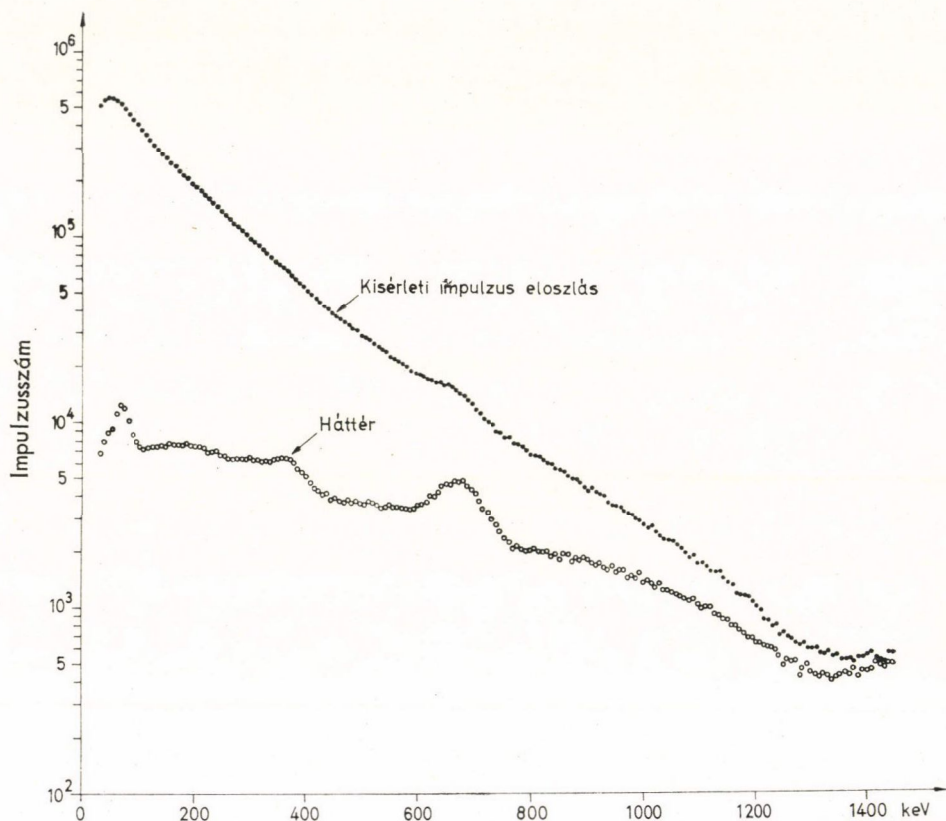
A 18. ábra mutatja, hogy a pofák jelenléte nem befolyásolja a spektrumot. Itt ugyanis azoknak az impulzusszámoknak a hányadosa van ábrázolva, amelyeket a mágneses pofák jelenlétében és azokat eltávolítva vettünk fel. Az elrendezés egyébként ezekben a mérésekben „klasszikus” volt, azaz az integrális BFS-i spektrum mérésekben szokásos. A kollimátor nyílás előtt egy 7 mm-es plexi abszorbens volt elhelyezve mindkét mérésben és mágneses tér akkor sem volt alkalmazva, mikor a pofák jelen voltak. Amint az ábrán látható a pofák jelenléte semmiféle szisztematikus torzulást nem okoz az impulzus eloszlásban.

A BFS-i spektrumnak megfelelő kísérleti impulzus eloszlásokat (a háttér kivonása után) a 20. ábrán mutatjuk be összehasonlítva a konvertált KUB Nilsson-elméletének megfelelőekkel (a 19. ábra mutatja a kísérleti impulzus eloszlást minden korrekció nélkül és a háttérrel). Mint már említettük korábban minden szükséges korrekciót az elméleti eloszlásra alkalmaztunk és az így korrigált elméleti spektrumot nevezzük konvertált elméleti spektrumnak, amely már közvetlenül összehasonlítható a kísérleti impulzus eloszlással. A „tisztá”, KUB Nilsson-elméletnek megfelelő BFS-i spektrumot a konvertálás előtt a 21. ábrán mutatjuk be.

Érthető, hogy a 20. ábrán csak két elméleti és három kísérleti eloszlás van. A két elméleti görbe a két fotocsúcs hatások görbének megfelelően adódik (abszorbenssel



és anélkül a kollimátor nyílás előtt). A három kísérleti érték sor viszont három különböző kísérleti feltételnek megfelelően adódik (csak abszorbens, csak mágneses tér, valamint abszorbens és mágneses tér együttesen alkalmazva az elektronok kiküszöbölésére), amelyek közül kettőnek ugyanaz az elméleti görbe felel meg. Az elméleti eloszlások ugyanis csak a fotocsúcs határfoknak megfelelően különböznek, ez utóbbit pedig csak az befolyásolja, hogy abszorbens volt-e közbehelyezve vagy nem. Hogy ezenkívül még mágneses tér is jelen volt-e vagy nem, az nem okoz változást.

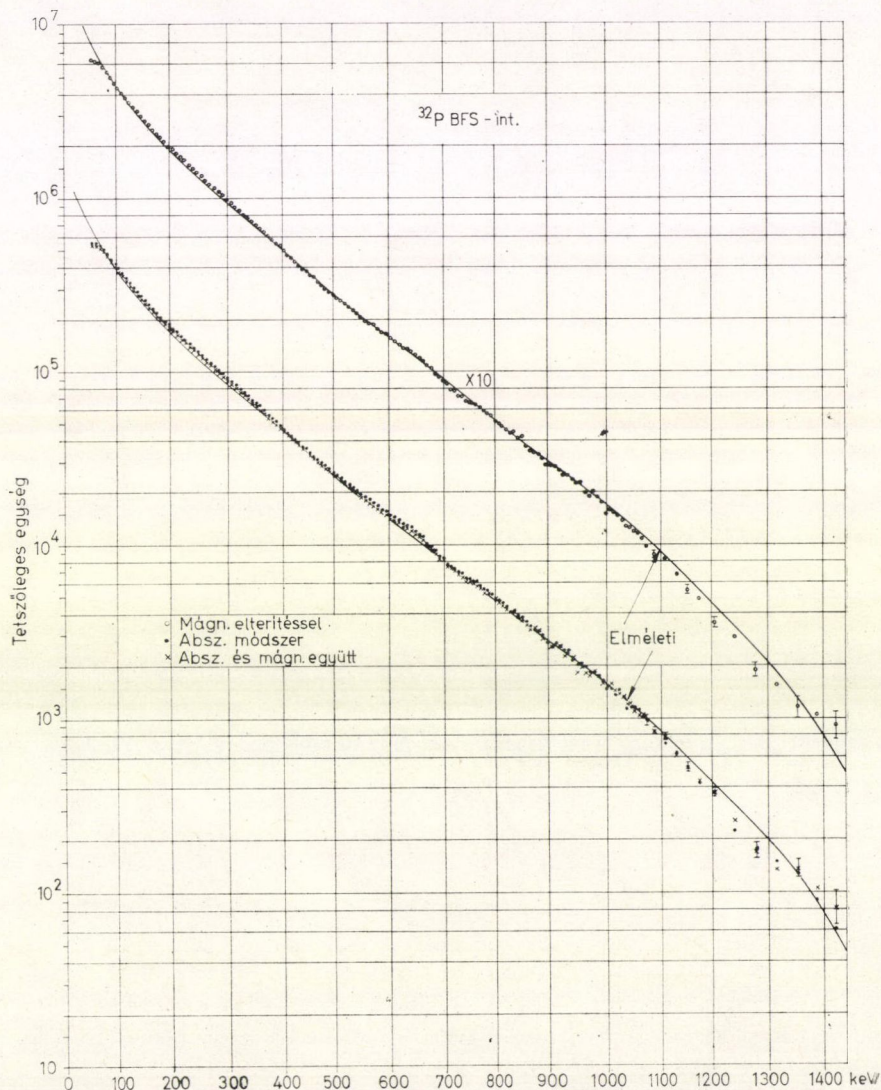


19. ábra. A kísérleti impulzus eloszlás minden korrekció nélkül és a háttér

A kísérleti és elméleti görbék illesztése a következőképpen történt. Az illesztési faktort úgy határoztuk meg, hogy az eltérés minimumát kapjuk az abszorbens és a mágneses tér együttes alkalmazásával nyert kísérleti értékek és a megfelelő elméleti görbe között a 430 keV körüli tartományban. Ugyanezt a faktort használtuk ezután a másik két kísérleti eloszlás és a megfelelő elméleti spektrumok illesztésénél. Az illesztési faktor kiszámításához azért választottuk azokat a kísérleti adatokat, amelyeket az abszorbens és a mágneses tér együttes alkalmazásával kaptunk, mert elvileg itt várható a legkisebb KFS-i hozzájárulás a mért



spektrumhoz, illetve pesszimális esetben is a KFS hozzájárulásának a mértéke a két másik (ti. a csak abszorpciós, illetve a csak mágneses módszerrel mért) kísérleti spektrumé közé kell essen. Ami a 430 keV-os tartományban történt illesztést illeti, ez azért látszott célszerűnek, mivel így kaphatunk a legszélesebb tartományban egyezést az elméleti spektrummal, ami elfogadható szempont akkor, amikor célunk a spektrum alak tanulmányozása. Ugyanakkor 430 keV körül még igen jó a statisztika is ( $\approx 0,5\%$  hiba). Egyébként pedig 60 és 1060 keV között bárhol is választjuk

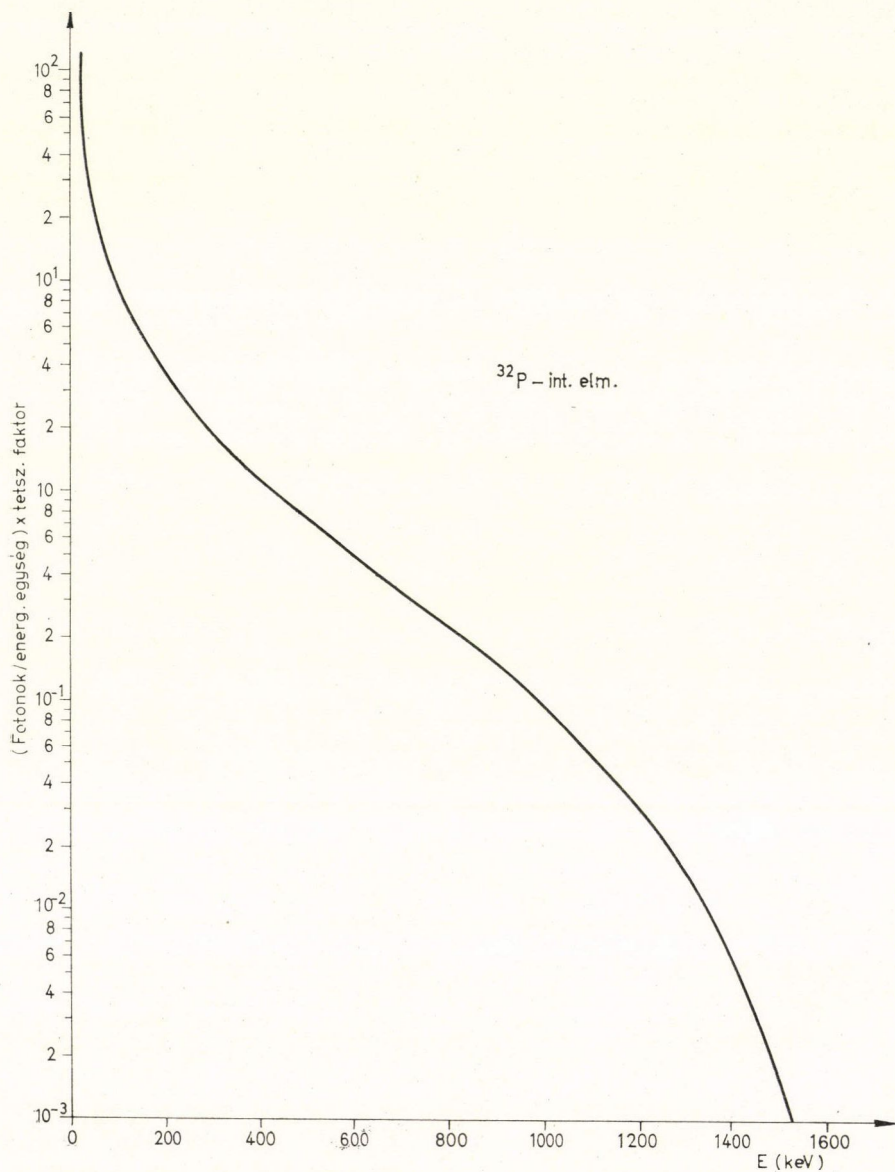


20. ábra. A kísérleti impulzus eloszlások összehasonlítása a konvertált elméletiekkel



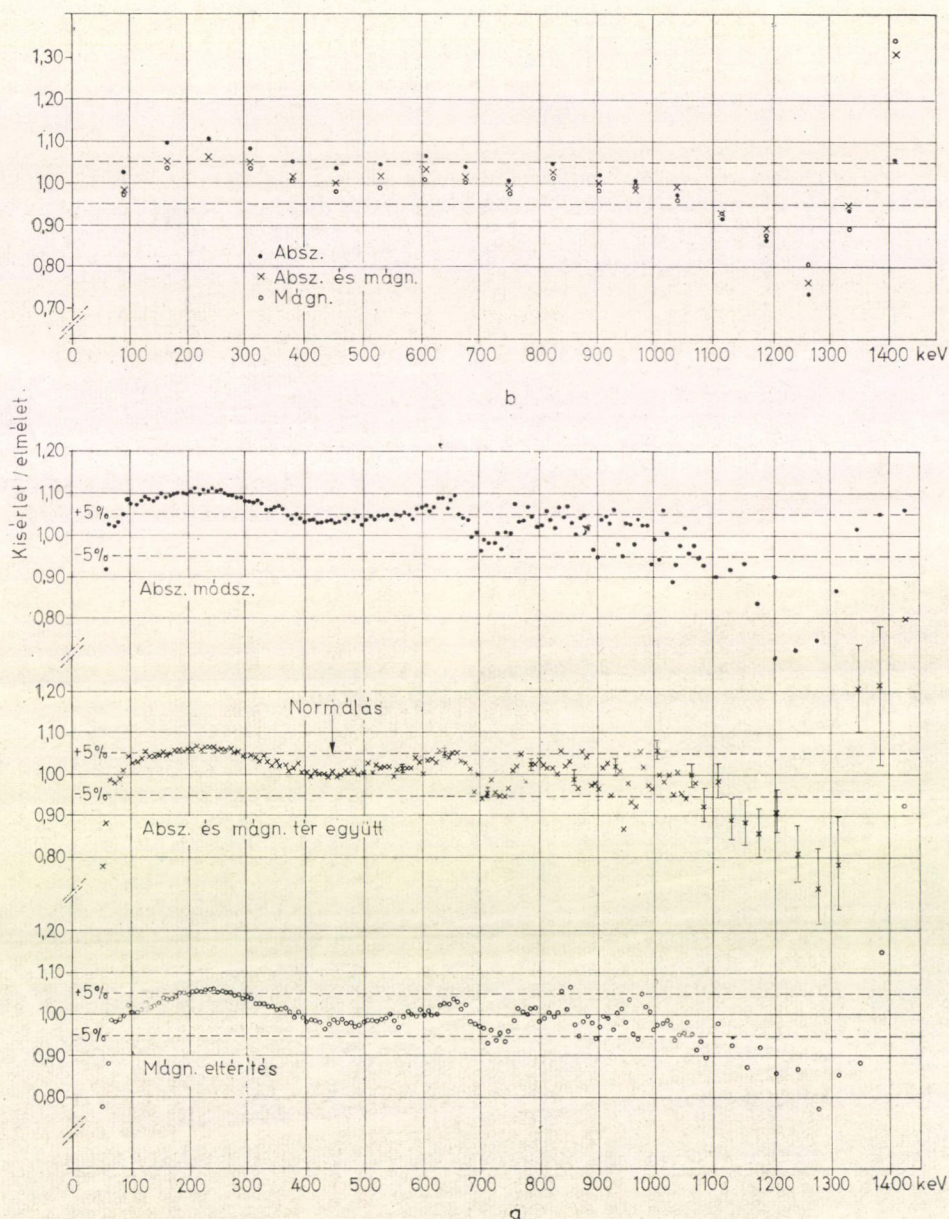
meg az illesztés helyét, ez legfeljebb  $\approx 6\%$ -os eltolódást jelent az elméleti görbével való egyezés szempontjából (lásd a 22. ábrát).

A részletes összehasonlítást az elméleti és kísérleti BFS-i spektrum között a különböző kísérleti feltételekre a 22. ábrán adjuk.



21. ábra. A  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektruma a KUB-Nilsson elmélet szerint minden kísérleti korrekció nélkül





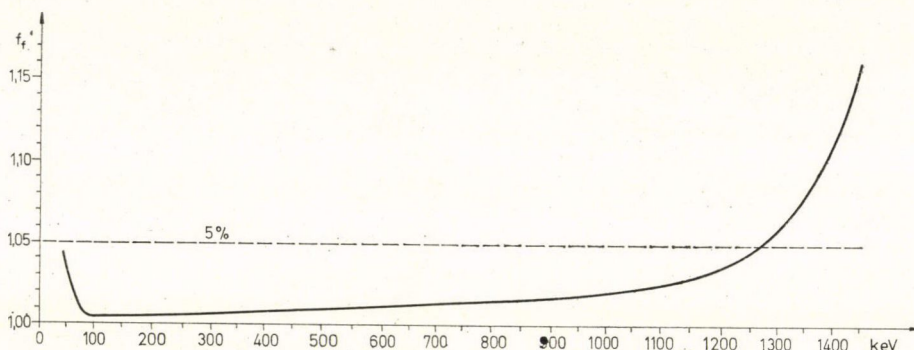
22. ábra. A kísérleti és a konvertált elméleti BFS-i spektrum hányadosa különböző kísérleti feltételek mellett. *b*-nél tízcsatornánként szummáztuk az impulzus számokat. *a*-nál a középső diagramon néhány esetben feltüntettük a statisztikus hibákat tájékozódásra



A statisztikus jellegű hibákról méréseinkben már tettünk említést. Nézzük most, hogy milyen nagyok az elvégzett korrekcióktól eredő hibák.

A legnagyobb korrekciót a fothatásfok hozza be vizsgálatainkba, ennek hibája azonban, mint azt már említettük, az alacsony energiájú tartományban nem nagyobb, mint 6% (600 keV alatt) és 600 keV felett pedig kisebb, mint 3%.

A Compton-korrekció mértéke szintén változik az energia függvényében. 1000 keV feletti energiákra az értéke kisebb, mint 10%-a a korrigálandó adatoknak. A legnagyobb értékét 550 keV körül éri el (16%) innen ismét csökken (60 keV-nél  $\approx 6\%$ ).



23. ábra. Korrekciós faktor a detektor energia feloldására Owen és Primakoff szerint saját mérési körülményeink között

Mint arról az előbbieken már említést tettünk, a detektor véges energia feloldására Owen és Primakoff [108] módszerével korrigáltunk. Bár ez a módszer valamivel nagyobb korrekciós értéket ad széles tartományban (a legkisebb energiáktól kb. 1200 keV-ig), mint Palmer és Laslett-é [109], de még ez az érték is igen kicsi (nem több, mint 1–2% 60-tól 1000–1100 keV-ig). 1100–1200 keV-től a nagyobb energiák felé a feloldási korrekció mindkét módszer szerint jelentősebb (23. ábra) lesz, viszont itt már a két eljárás jó közelítésben ugyanazt az eredményt adja.

#### 5.4. Kiegészítő mérések

Azért, hogy kiderítsük, hogy miért kaptunk abszorpciós módszerrel felvett BFS spektrumunkban impulzus többletet a mágnes alkalmazásával felvett spektrumhoz képest, és hogy ellenőrizzük a 5.2. pontban a mérési elrendezéssel és a lehetséges hibaforrásokkal kapcsolatos elgondolásainkat, néhány kiegészítő vizsgálatot is végeztünk.

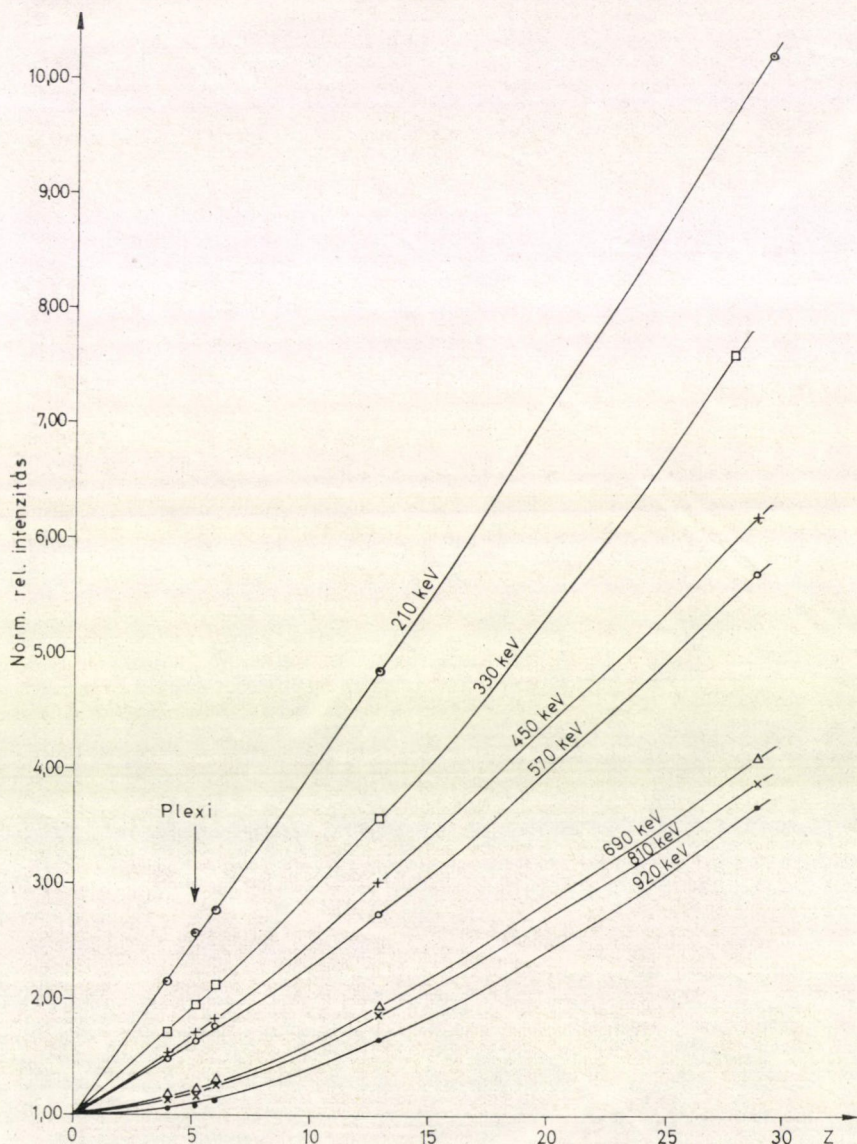
##### 5.4.1. Az $f_{\text{KFS}}/f_{\text{BFS}}$ hányados meghatározása és a plexi effektív Z-je

Mint már láttuk (5.2. pont), az  $f_{\text{KFS}}/f_{\text{BFS}}$  értéke befolyásolhatja a KFS hozzájárulását a mért BFS-i spektrumhoz.

Egy kiegészítő mérésben ennek a hányadosnak a változását vizsgáltuk az energia és az abszorbens Z-jének a függvényében. Az alkalmazott kristály mérete  $65 \times 65$



mm<sup>3</sup>-es volt, körülvéve ólomvédelemmel és a gamma-sugárzás egy ólom kollimátoron jutott el hozzá. A <sup>32</sup>P forrás — néhány cm távolságban a kollimátor előtt elhelyezve — teljesen körül volt véve a különböző abszorbens anyagokkal, amelyek a következők voltak: Be, plexi, C, Al, Cu, Sn és Pb. Azután a mért impulzusszámot ábráztuk az abszorbensnek rendszámának a függvényében az energiát paraméterként használva

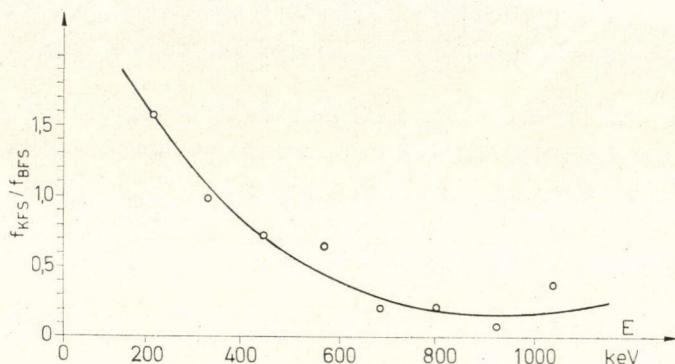


24. ábra. A különböző Z-jű abszorbensekkel teljesen körülvevett <sup>32</sup>P forrásból jövő fékezési sugárzás (belső és külső együtt) intenzitása normalizált ábrázolásban



(24. ábra). Ezeknek a görbéknek  $Z=0$ -ra történő extrapolálásával a BFS hozzájárulása és így az  $f_{\text{KFS}}/f_{\text{BFS}}$  hányados meghatározható az egyes abszorbensre különböző energiáknál.

A 25. ábra az  $f_{\text{KFS}}/f_{\text{BFS}}$  hányados változását mutatja az energia függvényében plexi abszorbensre. A viszony jellemző a KFS-i és a BFS-i spektrum egymáshoz



25. ábra. Az  $f_{\text{KFS}}/f_{\text{BFS}}$  hányados változása az energia függvényében plexi abszorbensre

viszonyított alakjára. Ha a KFS-i és a BFS-i sugárzási spektrumok alakja azonos lenne, a szóban forgó viszonyra konstans értéket kellene kapnunk az energia függvényében. Az  $f_{\text{KFS}}$  és  $f_{\text{BFS}}$  faktorok különben a külső, illetve belső fékezési sugárzási kvantumok emissziójának a valószínűségét adják meg egy kibocsátott béta-részecskére vonatkoztatva (feltéve, hogy az abszorbens elég vastag ahhoz, hogy a magból kilépő béta-részecskék teljesen abszorbeálódjanak benne).

A 24. ábrán látható görbék segítségével határozható meg megbízhatóan a plexi vagy más különböző  $Z$ -jú anyagokból összetett abszorbens effektív  $Z$ -je a külső fékezési sugárzás szempontjából. Konkrétan plexire  $Z_{\text{eff}} = 5,2$  adódott (lásd az ábrát).

Megjegyezzük, hogy hasonló görbék alapján történik a BFS-i spektrum tanulmányozásánál a KFS kiküszöbölése a  $Z=0$  abszorbensre történő extrapolációval.

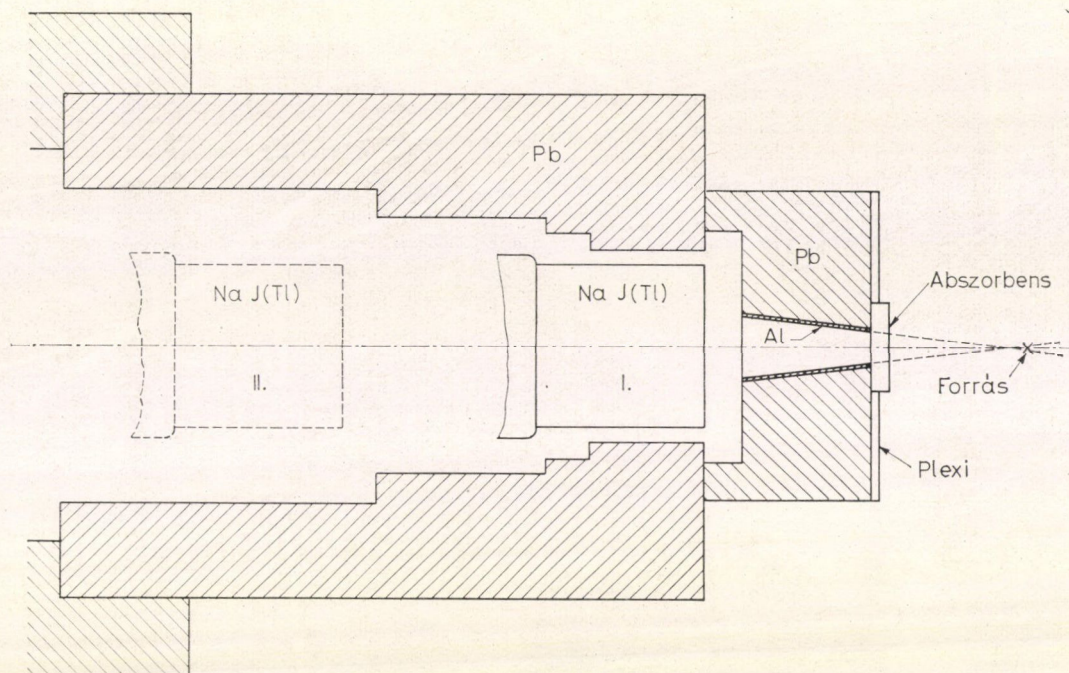
#### 5.4.2. A „rossz” geometria hatása

Egy tájékozódó kísérletet végeztünk a „rossz” geometria (lásd az 5.2. pontban) hatásának kísérleti ellenőrzésére is. Az ezekben a mérésekben alkalmazott elrendezés vázlatát a 26. ábrán mutatjuk be.

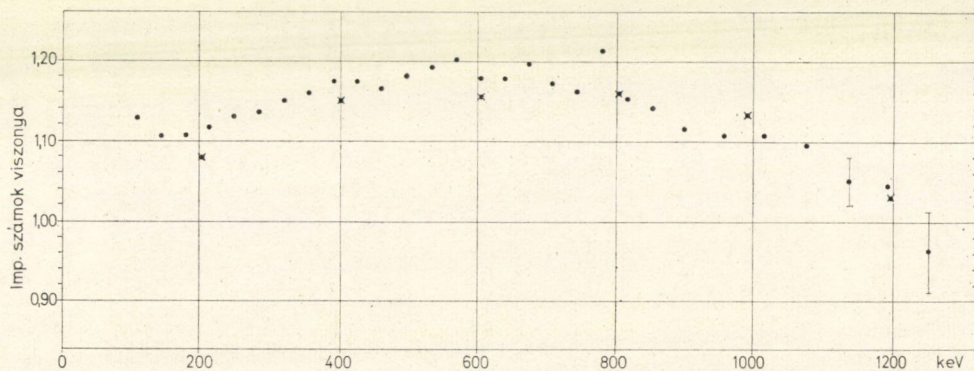
Több komplett mérési sorozatot vettünk fel háttérrel, hitelesítési ellenőrzéssel stb. mindkét geometriánál (lásd a 26. ábrán az I. és II. kristály helyzetet). Miután a kísérleti fotocsúcs hatások felhasználásával korrigáltuk a forrástól nagyobb távolságban levő kristállyal felvett spektrumot a kisebb detektálási hatásfokra (a nagyobb távolság miatt), képeztük a két spektrum hányadosát csatornánként. Mint a 27. ábrából látható „rossz” geometriánál (lásd az 5.2. pontban részletesen), azaz mikor a detektor és a forrás közel van egymáshoz, határozott többlet impulzusszám jelentkezik a spektrumban.

Megjegyezzük, hogy itt semmilyen korrekciót nem csináltunk a spektrumokban





26. ábra. A mérési elrendezés vázlata a „rossz” geometria hatásának ellenőrzésére végzett mérésekben



27. ábra. Két különböző geometriai elrendezésnél, azaz különböző forrásdetektor távolságnál („jó” és „rossz” geometria) felvett impulzus eloszlás hányadosa. A kereszttel megjelölt pontok jelentik a hányados értékét arra az esetre, amikor mindkét eloszlás  $Z=0$  abszorbensre lett extrapolálva

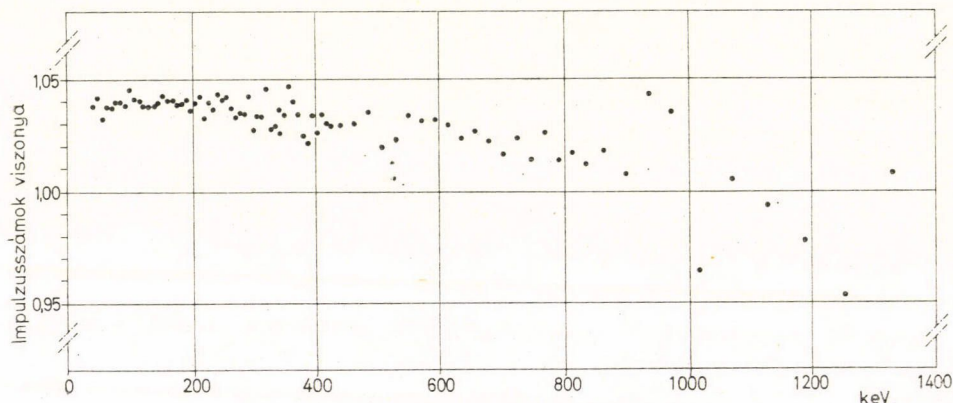


jelenlevő Compton-eloszlásra, azonban ez csak kisebb lefelé tolódást okozhat a 27. ábrán feltüntetett hányados értékeiben (minden pontnál biztosan kisebb, mint 5%), azonban következtetéseinket ez nem zavarja. Meg kell még jegyeznem továbbá azt is, hogy az általunk használt „rossz” geometriánál a publikált cikkekben lényegesen rosszabbakat is alkalmaztak.

A 28. ábrán a  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektrum alakjára végzett méréseinkben (5.2. pont) az abszorbenssel („klasszikus” elrendezés) és mágneses tér és abszorbens együttes alkalmazásával kapott kísérleti eloszlások (21. és 22. ábra) hányadosát tüntettük fel. A kapott értékek százalékosan meglehetősen kicsik, mert ebben a mérésünkben a geometriai elrendezés elég jó volt, de az eltérés típusa nagyon hasonlít ahhoz, amilyet a 27. ábrán láthatunk. Így kiegészítő méréseink alapján BFS méréseinkben az abszorpciós módszerrel kapott spektrumban jelentkező többlet impulzusszámot a mágneses tér alkalmazásával kapothoz képest, KFS jelenlétével magyarázhatjuk.

#### 5.4.3. Extrapolálás $Z=0$ abszorbensre

Az előbbieken tárgyalt tájékozódó kísérletünkben elvégeztük a  $Z=0$  extrapolálást mind a „jó”, mind a „rossz” geometria esetére. Ebben a kísérletben ugyanis az impulzus eloszlásokat különböző abszorbensre is felvettük (plexi, Al, Cu). Azután ábráztuk az impulzusszámokat az abszorbens rendszámának függvényében a különböző energiákra és az így kapott görbék segítségével a  $Z=0$ -ra való extrapolálás elvégezhető.



28. ábra. A  $^{32}\text{P}$  BFS-i spektrum alakjára végzett méréseinkben (5.3. pont és 20., valamint 22. ábra) az abszorbenssel, valamint a mágneses tér és abszorbens együttes alkalmazásával kapott eloszlások hányadosa

Esetünkben az extrapolált értékek „jó” és „rossz” geometriára nem egyeznek meg egymással. Ez a tény és az extrapolációs görbék konkrét formája az előzőekben már tárgyalt effektusokkal kapcsolatos és azokkal magyarázható (lásd 5.2. pont).

A 27. ábrán néhány esetben feltüntetettük az extrapolált értékek (mármint a „jó” és „rossz” geometria esetén kapott értékek) hányadosát is. Amint láthatjuk az extrapolálás a relatív viszonyokon nagyon keveset javított, s a „rossz” geometriánál felvett értékek az extrapolálás után is széles tartományban 10–15%-kal térnek el a „jó”



geometriának megfelelő értékektől, amelyek azonban még maguk is tartalmaznak több-kevesebb KFS-t. Ez a kísérlet is arra mutat tehát, hogy  $Z=0$  extrapolációval nem lehet a KFS-t teljesen kiküszöbölni, abból jelentős zavaró mennyiség maradhat meg még az extrapoláció után is, különösen „rossz” mérési geometria esetén.

Meg kell jegyeznünk végül, hogy a 27. ábrán látható típusú eltéréshez hasonló a  $^{32}\text{P}$  BFS-ának több kísérleti spektrumában [119, 121, 90, 96, 92, 94, 91] megfigyelhetünk (egyes esetekben tisztán, más esetekben más típusú eltérésekkel szuperponálódva).

### 5.5. Következtetések

Amint a 22. ábrán láthatjuk a  $^{32}\text{P}$  BFS-ra a kísérleti és elméleti spektrum alak között az egyezés jobb, mint 6%-os a 60-tól 1060 keV-ig terjedő tartományban. Ha az egyes korrekciók hibáit maximálisnak vesszük és feltételezzük, hogy mind peszsimálisan adódnak össze, az eltérés a KUB Nilsson-elmélettől akkor sem lehet több, mint 15% a fenti energia tartományban.

A következőkben összefoglaljuk, hogy melyek voltak azok a lényeges pontok a mérési feltételekben és a kiértékelésben, amelyekre különös gondot fordítottunk, amelyeket több esetben a korábbi közleményektől eltérően oldottunk meg és amelyek eredményeképpen végül is az előző bekezdésben körvonalazott egyezést kaptuk az elméleti eloszlással.

1. A külső fékezési sugárzás kiküszöbölésére nemcsak „jó” geometriát használtunk a „klasszikus” abszorpciós megoldásban, de ugyanabban a geometriában megoldottuk az elektronok kiküszöbölését mágneses tér segítségével is. Így egy és ugyanazon elrendezésben össze tudtuk hasonlítani a két módszert és kontrollálhattuk a külső fékezési sugárzás hozzájárulását az általánosan használt abszorpciós módszer esetében.

Méréseinknek ez az elrendezése lehetővé tette, hogy határozottan megcáfoljuk a [96]-ban közölt eredményeket, amelyeket mágneses tér alkalmazásával kaptak és amelyek minden más mérésnél nagyobb eltérést mutatnak a  $^{32}\text{P}$  BFS-ára vonatkozó elméleti eloszlástól, [96] volt különben eddig az egyetlen mérés, ahol mágneses teret alkalmaztak a forrásból jövő elektronok kiküszöbölésére a BFS-i spektrum széles tartományának vizsgálatánál.

2. A fotocsúcs határfok korrekciót a fotocsúcs határfok görbe kísérleti meghatározása alapján hajtottuk végre. A kísérleti meghatározás a Bécsi Atomenergia Ügynökség gamma-standard sorozatának felhasználásával történt, amelyeknek az aktivitása 1-től 3%-ig terjedő pontossággal van bemérve. Az így kapott határfok segítségével korrigálva különben egyúttal elvégeztük a gamma abszorpció, valamint részben a jó K-röntgen sugárzásának megszökése miatt fellépő korrekciót is.

A kísérleti fotocsúcs görbék megbízhatóságára mutat különben az az 1–2%-on belüli egyezés, ami a 22. ábrán a csak mágneses tér alkalmazásának megfelelő görbe és ezen görbe között van, amely a mágneses tér és az abszorbens együttes alkalmazásának felel meg. A két görbe esetében ugyanis két különböző fotocsúcs határfok görbét használtunk (az abszorbenssel, illetve az anélkül felvetett).

3. Méréseinkben igen jó volt a standard spektrumok alakja (lásd a  $^{137}\text{Cs}$ -ét a 16. ábrán), azaz nagy volt a fotocsúcs-Compton arány és gyakorlatilag teljesen hiányzott a visszaszórási csúcs. Ez részben a Compton-korrekció viszonylagos kicsiségét eredményezi, részben pedig szükségtelenné teszi az ún. visszaszórási-csúcs korrekciót.



4. A detektor véges energia feloldásával kapcsolatos probléma kritikai analízise után az Owen—Primakoff módszert alkalmaztuk a korrigálásnál.

5. Jelen vizsgálatokban az elméleti foton spektrumot konvertáltuk (erre alkalmaztuk ellenkező előjellel a szükséges korrekciókat) impulzus eloszlássá és nem fordítva. Ez több szempontból is előnyös a kiértékelési eljárás folyamán. Egy statisztikus hibáktól mentes elméleti görbét könnyebben kezelhetünk (pl. a második differenciál hányados meghatározásánál, amely a feloldási korrekciónál szükséges). Így nincs szükség kiegészítő Compton-korrekcióra sem, amely a spektrum nagyobb energiájú, kísérletileg már nem vizsgált részének a Compton-eloszláson keresztül kifejtett hatását veszi figyelembe.

6. A spektrum alak vizsgálata az elméleti és kísérleti eloszlások egymáshoz normálásával történt. Így elkerültük a forrás abszolút béta aktivitásának meghatározásából eredő hibát.

A felsorolt pontokat és az irodalmat áttekintve meg kell állapítanunk, hogy a korábbi vizsgálatoknál is éppen azok kaptak egyezést az elmélet és kísérlet között, akik az előbbi pontokban vagy legalább azok közül a legfontosabbakban tudatosan vagy öntudatlanul szintén a helyes megoldásokat választották. Így pl. *Hakeem* és *Goodrich* [89] 1962-ben igen jó geometriánál (a legjobbnál az összes publikált integrális mérések közül) végezték méréseiket, a fotocsúcs korrekciót empirikus alapon hajtották végre (bár nem pontosan úgy, mint az a mi esetünkben történt) és igen jó volt a standard-spektrumaik formája is (relatív alacsony Compton-eloszlás a fotocsúchhoz képest, elhanyagolható visszaszórási csúcs), ugyanakkor az elméleti és kísérleti spektrumot normálással hasonlították össze. Kb. ugyanabban az energiatartományban és hasonló pontossággal kaptak egyezést a KUB Nilsson-elmélettel, mint a mi méréseinkben. Ugyanígy egyezést kapott *Persson* is [93]. Nála a koincidencia elrendezés eleve kizárta külső fékezési sugárzás felléptét. Igaz, hogy éppen a koincidencia-módszer miatt a statisztikus pontosság lényegesen rosszabb *Persson* esetében, mint az integrális méréseknél, viszont a tapasztalat szerint, ha van eltérés az elméleti és kísérleti eloszlás között, az éppen a 90°-os differenciális mérésekben jelentkezik a legkifejezettebben [88, 93].

Mindezek alapján az látszik a legvalószínűbbnek, hogy a korábban észlelt különféle eltérések a KUB Nilsson-elmélettől instrumentális eredetűek és hogy ez az elmélet helyesen írja le a BFS-i spektrumot megengedett átmenetekben, legalábbis, ami a spektrum legnagyobb részét illeti.

A spektrum 1100 keV feletti tartományában feltétlenül további vizsgálatok szükségesek alacsonyabb háttérnél és nagyobb hatásfokú és (vagy) jobb feloldóképességű detektorral. Ami jelen méréseinket illeti, ezek az 1100 keV feletti tartományban egészen 1400 keV-ig csak mintegy 20—25%-on belüli egyezést mutatnak a kísérlet és az elmélet között és ugyanakkor a kísérleti adatok kisebbek az elmélethez képest. Ennek valószínű oka az igen nagy háttér ebben a tartományban (lásd a 19. ábrát) és a  $^{40}\text{K}$  1460 keV-os gamma vonalának jelenléte a háttérben. Ha mindehhez hozzájárul a berendezés instabilitása, akkor legalább kvalitatíve magyarázható a spektrum e tartományában észlelt jelenség (hasonló történt a  $^{137}\text{Cs}$  csúcs háttérben való jelenlétével kapcsolatban is, de ott a háttér relatíve sokkal kisebb volt és ezért az okozott effektus is). Mindenesetre figyelemre méltó, hogy *Hakeem* és *Goodrich* a már említett kitérő méréseikben [89] a szóban forgó tartományban, nagyságát és irányát tekintve a miénkhez hasonló eltérést kaptak. Ugyanígy *Narasimhamurty* és *Janananda* [91], akik egyébként kisebb és közepes energiáknál jelentős pozitív eltérést találtak.



## 6. Differenciális mérések a béta-bomlást kísérő BFS energieloszlásra vonatkozólag

### 6.1. A BFS vizsgálata a $^{11}\text{C}$ (21 perc) pozitív béta bomlásában

A negatív béta-bomlásból eredő fékezési sugárzás felfedezése után (Aston, 1927 [68]) majd két évtizedet kellett várni, amíg az elektron befogást kísérő belső fékezési sugárzást kimutatták (Brandt és munkatársai, 1946 [61]). További több mint húsz év telt el, amíg sikerült a pozitív béta-bomlásban kilépő BFS spektrumát is megvizsgálni (Berényi és munkatársai, 1967–1968, [125–128]) a  $^{11}\text{C}$  (21 perc) bomlásában. A fő nehézséget ez utóbbi esetben az annihilációs sugárzás jelenléte okozza. Legújabban a pozitív béta-bomló  $^{82}\text{Rb}$  BFS-ának vizsgálatára vonatkozólag is történtek előzetes közlések [129].

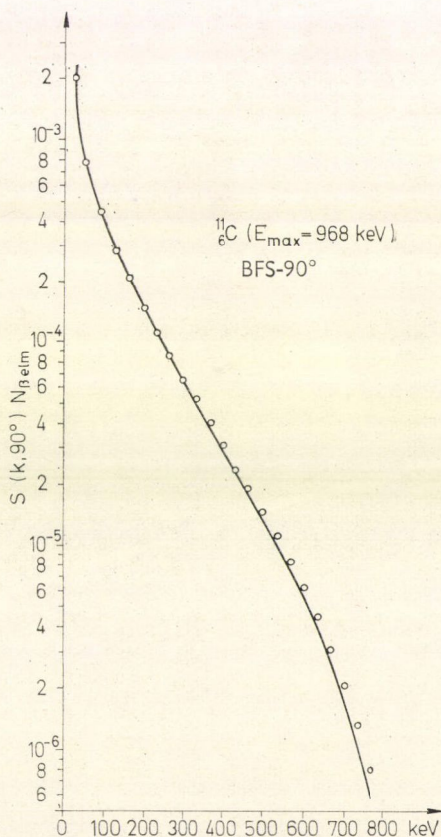
A  $^{11}\text{C}$  bomlása ugyanakkor egy alacsony rendszámú mag kedvezően megengedett bomlása ( $\log ft = 3,6$  [113]). A BFS-i elmélet ellenőrzésére éppen az ilyen átmenetek alkalmasak, ahol a bomlás kedvezően megengedett volta miatt magasabb rendű effektusok, az alacsony rendszám miatt pedig a mag Coulomb-tere nem okozhatnak zavarokat.

A 29. ábrán látható, hogyha a KUB Nilsson [69, 70, 73, 74] elmélet szerint negatív és pozitív béta-bomló „ $^{11}\text{C}$ ”-re kiszámítjuk a BFS-i spektrumot, azok a spektrum legnagyobb részében alig különböznek egymástól. Ez igen szemléltetően mutatja a magtöltés, tehát a rendszám hatását ebben az esetben. Nagyobb rendszámnál a hatás nagyobb (lásd a megfelelő spektrumokat  $^{32}\text{P}$ -re a 30. ábrán).

Eddig egy kedvezően megengedett bomlásra vonatkozóan történtek ilyen vizsgálatok, az alacsony rendszámú  $^6\text{He}$  esetében [130–132], ezek azonban relatív mérések voltak.

A  $^{11}\text{C}$  BFS-ára vonatkozó méréseinkben a differenciális BFS-i spektrumot vizsgáltuk meg  $90^\circ$ -nál (a béta-részecske és a gamma-kvantum kirepülési irányai között) egy  $\beta - \gamma$  (BFS) koincidencia elrendezésben. A koincidencia mérésekben lehetséges az elmélet és kísérlet abszolút összehasonlítása, anélkül, hogy a forrás erősségét meg kellene határozni.

Kísérleti elrendezésünkben az annihilációs sugárzás nem tudott semmiféle instrumentális zavaró effektust előidézni (lásd részletesen a 6.4. pontban). Ugyanis mindkét számláló teljesen körül volt véve és egymástól szeparálva egy megfelelően



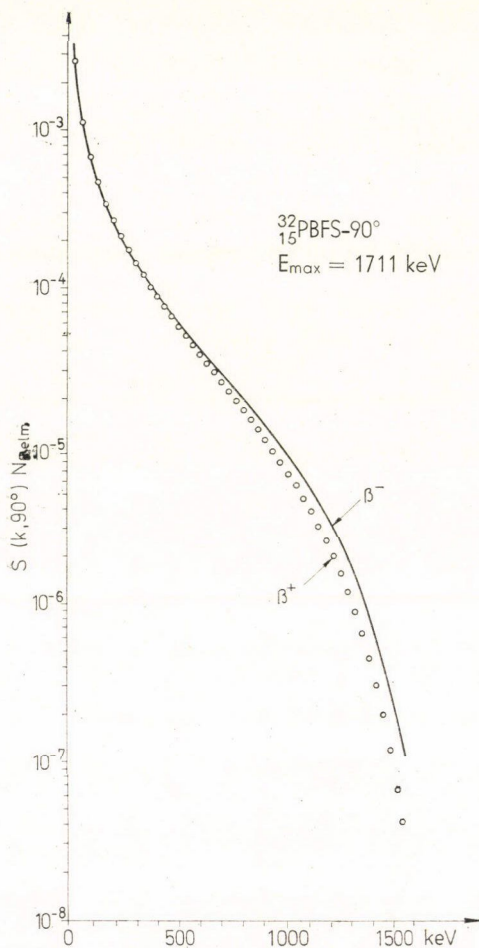
29. ábra. Elméleti BFS-i spektrumok pozitív béta-bomló  $^{11}\text{C}$  esetében (folytonos görbe) és a  $^{11}\text{C}$ -et negatív béta bomlónak feltételezve ( $\circ$ ).



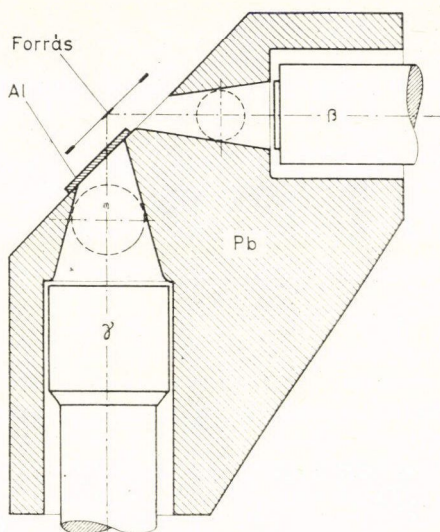
kialakított ólom védelemmel, úgy, hogy a detektorok kúpos diafragmákon keresztül látták a forrást (lásd a 31., 32., 33. és 34. ábrákat). A diafragmák és a detektorok tengelyei  $90^\circ$ -ot zárnak be.

A mérésekhez a forrásokat egy kaszkád generátorban állítottuk elő  $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$  folyamattal. A gyorsító feszültség 500–600 kV volt és a targetáram 5–6  $\mu\text{A}$ . Több mint száz, egyenként 1200 sec-os besugárzást végeztünk és ezeket általában 2000 sec-os mérések követték. Az egyes források erőssége kb. 10  $\mu\text{C}$  volt. A koincidencia kör feloldóideje ( $2\tau$ ) pedig  $\approx 10$  nsec a konkrét mérésekben ( $^{60}\text{Co}$  gamma-sugaraira kb. a fele az előbbi értéknek).

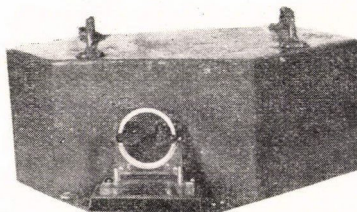
A kiértékelési eljárás és a kontroll mérések, valamint ellenőrző számítások részletes tárgyalásra kerülnek a 6.4. pontban. Itt csak felsoroljuk a kísérleti adatokra



30. ábra. Az elméleti BFS-i spektrum negatív béta-bomló (folytonos görbe) és pozitív béta-bomlónak feltételezett ( $\circ$ )  $^{32}\text{P}$ -re

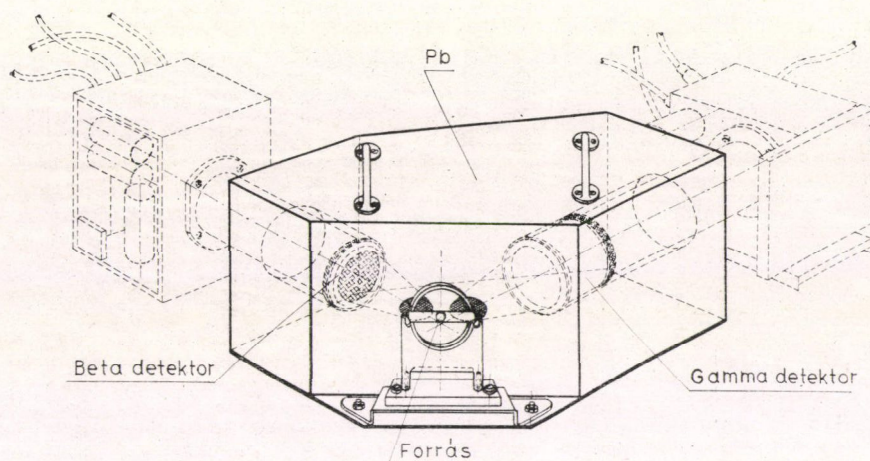


31. ábra. A differenciális BFS-i spektrum mérésnél használt elrendezés metszete



32. ábra. A 31. ábrán metszetben látható elrendezés fényképe





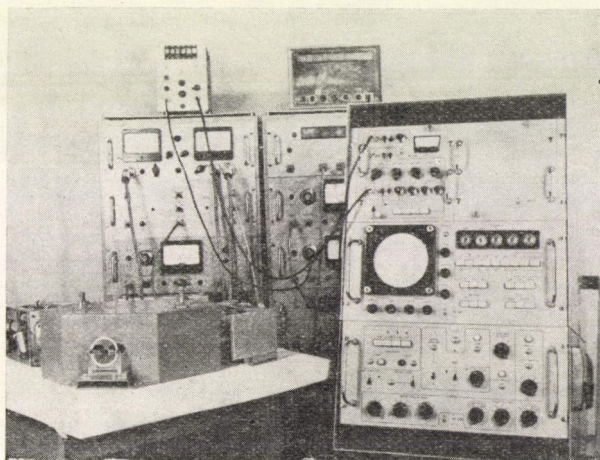
33. ábra. A detektorok elhelyezkedése a megfelelően kialakított ólomvédelemben (lásd 31. és 32. ábra)

alkalmazott korrekciókat: véletlen koincidencia, háttér, béta- és gamma-abszorpció, fotocsúcs hatások, a detektor véges energia feloldása, Compton eloszlás a szcintillációs spektrumban, koincidencia hatások.

A felsorolt korrekciókon kívül, mint említettük, egy sor kontroll mérést és ellenőrző számítást is végrehajtottunk, így a szcintillációs spektrumban levő visszaszórás csúcs hatására, a holt időre a béta- és gamma-csatornában, a forrás vastagság és hátlap jelentőségére, a környezetből történő szórásra, továbbá esetleges utóimpulzusokra a gamma-csatornában.

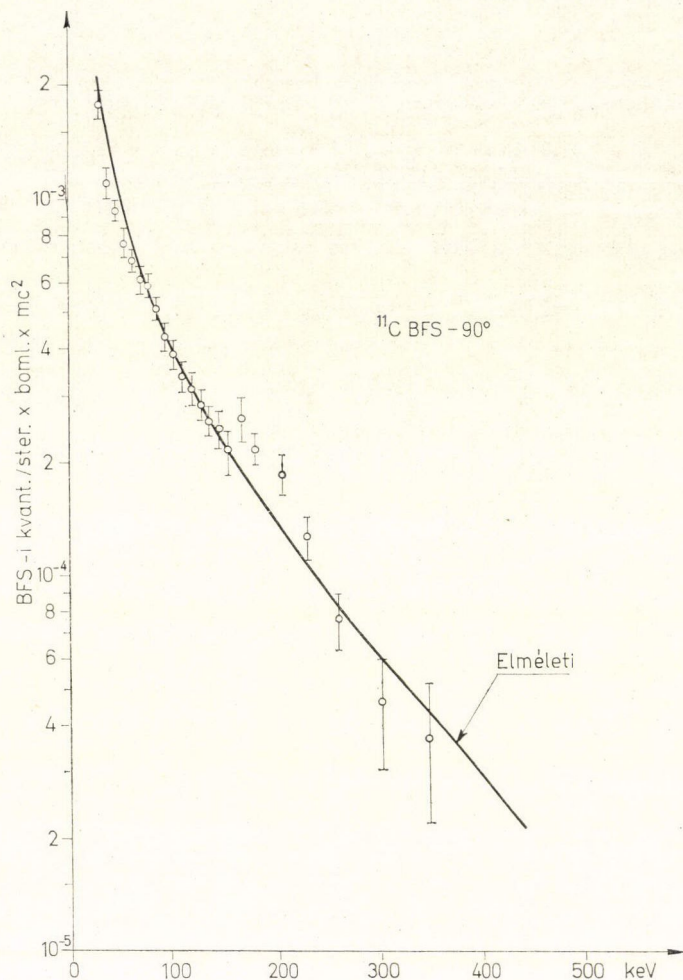
A 35. ábra mutatja a korrigált kísérleti adatokat a KUB Nilsson-elmélettel [69, 70, 73, 74] összehasonlítva. Az ábrán csak a statisztikus hibák vannak feltüntetve. Ugyanígy a 36. ábrán, ahol a kísérleti és elméleti értékek hányadosát ábrázoltuk a béta-spektrum maximális energiáját választva mint energia egységet. Ugyanezen az ábrán látható a hasonló diagram a  ${}^6\text{He}$  esetére is.

Az ábra alapján az elméleti és kísérleti eloszlás a hibahatáron kívül maximálisan 27%-kal tér el egymástól csak a statisztikus hibákat véve figyelembe. A korrekciók okozta hibákat is tekintve, amelyek összesen mintegy 20–25%-ot tesznek ki, maxi-



34. ábra. A differenciális BFS-i spektrum mérésnél használt ólomvédelem és elektronika fényképe



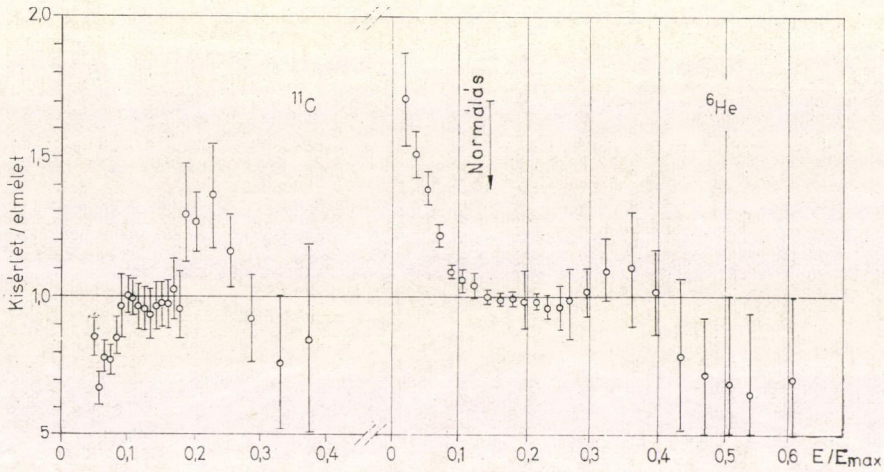


35. ábra. A  $^{11}\text{C}$  differenciális BFS-i spektrum a KUB Nilsson elméleti eloszlással összehasonlítva

málisan, a megengedett elméleti spektrumtól nem sikerült eltérést kimutatni. Mint ugyancsak a 36. ábrán láthatjuk,  $^6\text{He}$  esetében a hibahatáron kívüli maximális eltérés kb. 55%-os a statisztikus hibákat figyelembe véve és ugyanakkor ez utóbbi mérés nem abszolút, az ábrán megjelölt tartományban illesztve lett egymáshoz az elméleti és kísérleti eloszlás.

Kétségtelen, hogy spektrumunkban 200–250 keV körül (és a kis energiáknál is) jelentkezik egy szisztematikus felugrás. Ezek eredetét nem lehetett egyértelműen kideríteni, bár végiggondoltunk számos lehetséges zavaró effektust. Legvalószínűbbnek az látszik, hogy a felugrások több korrekció szisztematikus hibájának összegeződéséből adódnak, (lásd részletesebben a 6.4. pontban), továbbá hozzájárulhatnak az esetlegesen ebben a tartományban koncentrálódó háttér koincidenciák is.





36. ábra. A kísérleti és elméleti BFS-i spektrum viszonya a  $^{11}\text{C}$  és a  $^6\text{He}$  esetére

### 6.2. A $^{143}\text{Pr}$ BFS-i spektrumának vizsgálata

A  $^{143}\text{Pr}$  bomlása első rendben nem egyértelműen tiltott bomlás. Az ebből a bomlásból eredő BFS-i spektrum vizsgálatára két integrális mérés történt eddig [100, 101, 135] és mindkét esetben pozitív eltérést találtak mind az eredeti KUB [69, 70], mind a mag Coulomb-terének hatását figyelembe vevő KUB elméletéhez [73, 74] képest.

Tekintve, hogy differenciális mérés a szóban forgó spektrumra vonatkozólag még nem történt és a tapasztalat szerint (lásd pl. [88, 93]) az elmélettől való eltérések a  $90^\circ$ -os differenciális mérésekben jelentkeznek legkifejezettebben a BFS-i spektrumban, ezért határoztuk el a jelen vizsgálatok elvégzését az 6.1. pontban leírt kísérleti elrendezésben. Az idő-amplitúdó konverter időfeloldása ezekben a mérésekben is  $2\tau \approx 10$  nsec-re volt beállítva [133, 134].

A  $^{143}\text{Pr}$  radioaktív készítményt a Szovjetunióból kaptuk (Techsnabexport, Moszkva). A szennyezéseket ion-cserés módszerrel végzett gondos tisztítással távolítottuk el. A méréseinkben használt forrás aktivitása kb.  $100 \mu\text{C}$  volt.

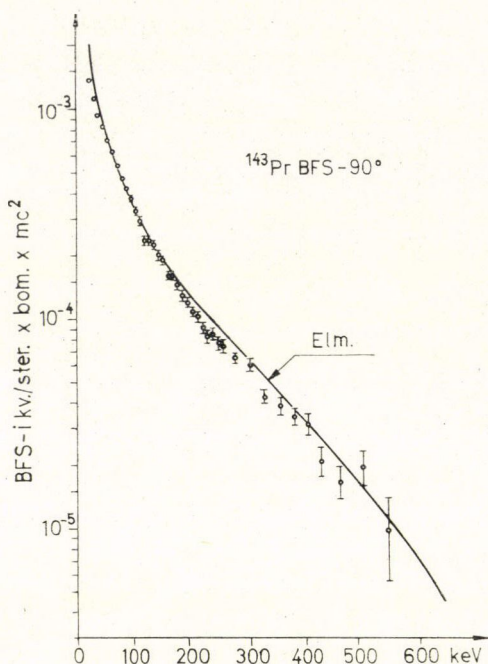
Az egyes mérésorozatokban a koincidenca spektrumon kívül a singles béta impulzus számot, valamint a megfelelő háttérét is mértük. A koincidenca háttér elhanyagolhatóan kicsi volt. A totál és véletlen koincidenca spektrum (az utóbbi megfelelő késleltetés beiktatásával) felváltva lett mérve. A mérések alatt rendszeresen ellenőriztük a berendezés stabilitását is. A teljes, valamennyi sorozatból összegzett béta impulzusszám  $4,3 \cdot 10^9$  volt a háttér levonása után.

A kísérleti spektrum kiértékelését ugyanazon módszer szerint végeztük, mint a  $^{11}\text{C}$  esetében (lásd részletesen a 6.4 pontban).

A 37. ábrán mutatjuk be a korrigált kísérleti adatokat összehasonlítva a KUB Nilsson [69, 70, 73, 74] megengedett elméleti spektrummal. Az ábrán csak a statisztikus hibák vannak feltüntetve.

A korrekciók hibáját is figyelembe véve (átlagosan 10–15, maximálisan 20–25%) megállapíthatjuk, hogy az egyezés a kísérleti és megengedett elméleti eloszlások között elég jó.





37. ábra. Differenciális BFS-i spektrum a  $^{143}\text{Pr}$  első rendben nem egyértelműen tiltott béta-bomlásából összehasonlítva a megengedett elmélettel

Ez a következtetés határozottan ellentétben van az előző két integrális méréssel. Ezek egyikében [135] a kísérleti spektrum mintegy 50–60%-kal magasabb, mint az elméleti (az eltérés maximuma kb. 200 keV-nál van), míg a másik esetben [100, 101] az eltérés maximuma kb. 100 keV-nál van (itt kb. 100%), de még a magasabb energiáknál is legalább 40–50%. A mi méréseink azonban 20%-nál nagyobb pozitív kísérleti eltérést sehol sem engednek meg a vizsgált energiatarományban, még akkor se, ha a hibák maximális értékeit összegezzük.

A két előző mérésben észlelt eltéréseket valószínűleg instrumentális okokkal lehet magyarázni, olyan jellegűekkel, amelyeket részletesen tárgyaltunk az 5. pontban ([135]-ben pl. henger alakú kollimátort használtak; [100, 101]-ben pedig mágneses teret alkalmaztak a forrásból eredő elektronok kiküszöbölésére olyan elrendezésben, amely a  $^{32}\text{P}$  esetében is teljesen hibás kísérleti eredményre vezetett).

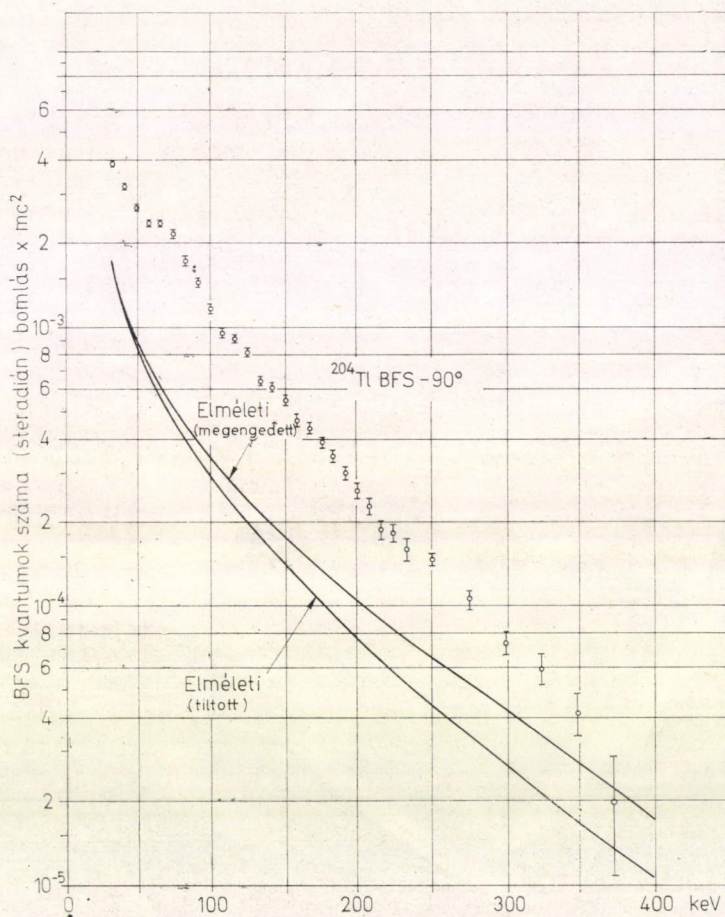
### 6.3. A $^{204}\text{Tl}$ BFS-i spektruma

A  $^{204}\text{Tl}$  első rendben egyértelműen tiltott béta-bomlással alakul át  $^{204}\text{Pb}$ -á (a kb. 2%-os elektronbefogásos bomlást itt elhanyagolhatjuk). Első rendben egyértelműen tiltott béta-bomlásokból eredő belső fékezési sugárzásra vonatkozólag meglehetősen sok mérés történt (a BFS-i spektrumokra vonatkozó mérések nagyobb része ilyen jellegű átmenetekre vonatkozik):  $^{42}\text{K}$  [137],  $^{89}\text{Sr}$  [138, 93],  $^{90}\text{Y}$  [138, 121, 139, 140, 89, 141, 87, 86],  $^{90}\text{Sr}$  [86],  $^{91}\text{Y}$  [120, 93, 87, 142]. A felsorolt munkák között vannak differenciális és integrális mérések is és általában a fenti izotópok BFS-i spektrumának vizsgálatánál jelentős eltéréseket találtak mind a megengedett, mind az első rendben egyértelműen tiltott átmenetekre kidolgozott elmélettől. A tapasztalat, mint már korábban is említettük, azt mutatta, hogy az elmélettől való eltérések a legkifejezettebben a 90°-nál mért differenciális spektrumban jelentkeznek.

Mivel a  $^{204}\text{Tl}$  egyértelműen első rendben tiltott béta-bomlásából eredő BFS spektrumára még csak két integrális mérést végeztek [143, 142] és mindkét esetben nemcsak az elmélettől találtak eltérést, hanem a két mérés kissé egymással is ellentmondásban van, érdemesnek látszott a szóban forgó BFS-i spektrumot differenciálisan, 90°-nál (a béta-részecske és a BFS-i kvantum kibocsátási iránya között) megvizsgálni [136, 134].



A méréseknél ugyanazt a kísérleti elrendezést és kiértékelési eljárást alkalmaztuk, mint a  $^{11}\text{C}$  és  $^{143}\text{Pr}$  esetében (lásd a 6.1. és 6.2., valamint 6.4. pontokat). Ebben az elrendezésben az elektron befogási elágazásból eredő röntgen-sugarak sem zavarhatnak.



38. ábra. A  $^{204}\text{Tl}$  első rendben egyértelműen tiltott béta-bomlásából eredő BFS spektruma összehasonlítva a megengedett [69, 70, 73, 74] és a tiltott [72, 93] elméleti eloszlással

A  $^{204}\text{Tl}$  radioaktív anyagot a Szovjetunióból kaptuk (Techsnabexport, Moszkva). A méréseinkben használt forrás erőssége  $\approx 20 \mu\text{C}$  volt.

A mérőszorozatok felépítése olyan volt, mint a  $^{143}\text{Pr}$  esetében. A teljes béta impulzusszám valamennyi sorozatból szummázva  $7,2 \times 10^8$  volt a háttér levonása után.

A 38. ábra mutatja a korrigált kísérleti adatokat összehasonlítva a megengedett [69, 70, 73, 74] és az első rendben egyértelműen tiltott bomlásokra vonatkozó [72, 93] elmélettel. Az ábrán csak a statisztikus hibák vannak feltüntetve. A korrekciók-



tól eredő össz-átlagos hiba  $\approx 10\%$ , de a tőlük eredő hiba maximálisan sem lehet több, mint  $20\%$ , a vizsgált tartomány legnagyobb részében.

Mindezek alapján megállapíthatjuk, hogy a szóban forgó esetben a kísérleti eloszlás határozott és nagy mértékű eltérést mutat mind a megengedett, mind a megfelelő tiltott elméleti spektrumtól a legkisebb energiáktól fel egészen  $370\text{--}380\text{ keV}$ -ig.

Ez az eredmény kvalitatív egyezésben van a két korábbi integrális méréssel, [143] kb.  $150\text{ keV}$ -tól, [142] kb.  $300\text{ keV}$ -tól lefelé tapasztalt a megengedett elméleti spektrumtól határozott eltérést.

#### 6.4. Kiértékelési eljárás és korrekciók a $^{11}\text{C}$ BFS-i spektrumának differenciális vizsgálatánál

A kísérleti és elméleti spektrum összehasonlítására a következő összefüggésből indulunk ki [144]:

$$\frac{S(k, 90^\circ)}{N_{\beta \text{ elm}}} = \frac{1}{4\pi \Delta k N_{\beta}} [N_{\text{koine}}(k) - N_C(k)] \frac{f_{\beta}(k)}{f_{\gamma}(k) \varepsilon_{\text{absz}}(k) \varepsilon_{\text{koine}}(k)}$$

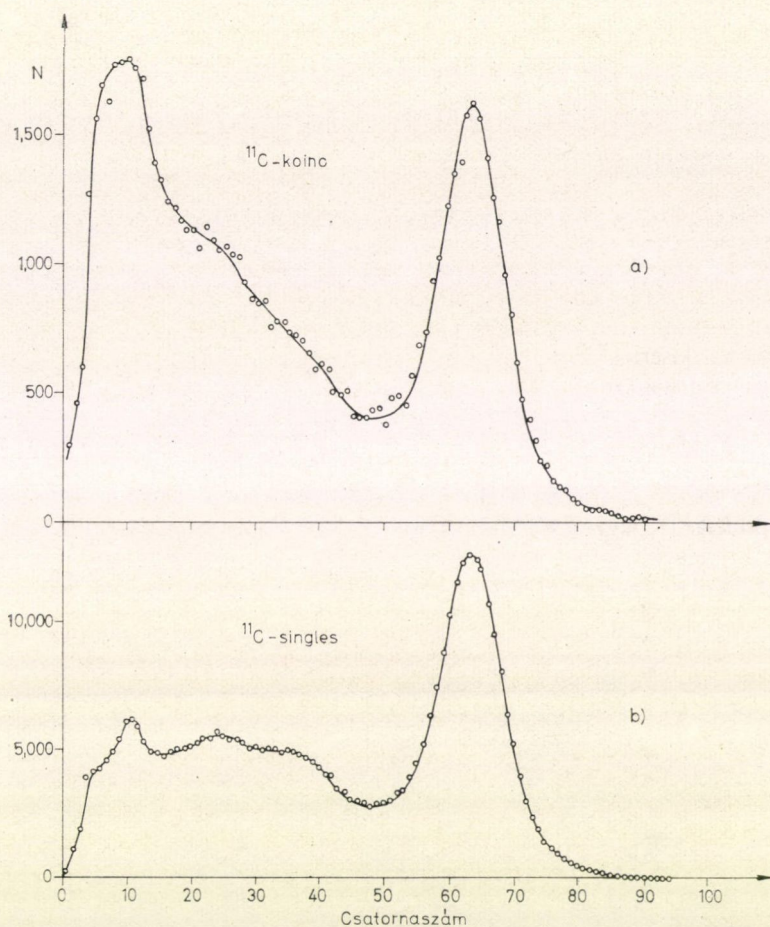
Bal oldalon a béta-bomlásonként  $90^\circ$ -nál egységnyi térszögbe és  $k$  energiánál egy, ségnyi energia intervallumba (az energia  $\text{mc}^2$  ún. természetes egységekben mérve) kisugárzott BFS-i kvantumok számának elméleti értéke áll. Jobb oldalon  $\Delta k$  a kísérleti csatornaszélesség  $\text{mc}^2$  energiaegységekben kifejezve,  $N_{\beta}$  a teljes béta impulzusszám valamennyi sorozatból összegezve a háttér levonása után,  $N_C(k)$  a Compton-korrektó értéke a megfelelő energiánál,  $f_{\beta}(k)$  korrekciós faktor a béta-abszorpcióra,  $f_{\gamma}(k)$  ugyanaz a fotocsúcs hatásfokra,  $\varepsilon_{\text{absz}}(k)$  a gamma-abszorpcióra és  $\varepsilon_{\text{koine}}(k)$  a koinkidencia hatásfokra.

A tulajdonképpeni korrigálandó koinkidencia-spektrumot az  $N_{\text{koine}}(k)$  jelenti. Ezt úgy kapjuk meg, hogy a valamennyi sorozatból csatornánként összegezett totál koinkidencia-számból levonjuk a háttér és a véletlen koinkidenciák számát. Az így kapott értékeket korrigáljuk azután tovább Compton-eloszlásra, fotocsúcs hatásfokra, gamma- és béta-abszorpcióra, koinkidencia hatásfokra és a detektor véges energia feloldására. A következőkben ezeket egyenként tárgyaljuk részleteikben.

##### 6.4.1. A kiértékelés első lépései

Méréseinkben a koinkidencia háttér elhanyagolhatóan kicsi volt (egy-két koinkidencia impulzus a spektrum egészében sorozatonként), a béta háttér pedig a béta impulzusszám  $10\text{--}20\%$ -a a konkrét sorozattól függően. A véletlen koinkidenciákra a korrigálás a következőképpen történt. A  $^{11}\text{C}$  singles gamma-spektrumát normáltuk a totál koinkidencia-spektrumban levő  $511\text{ keV}$ -os csúshoz és az így normált singles spektrumot levontuk a totál koinkidencia eloszlásból. Esetünkben ugyanis a véletlen koinkidencia-spektrum alakja teljesen megegyezett a singles spektrummal gyakorlatilag az egész energia tartományban (a legkisebb energiákat kivéve) és a valódi koinkidenciák száma pedig az  $511\text{ keV}$ -os csúcs helyén már a hibákhoz képest elhanyagolhatóan kicsi volt. A 39. ábra mutatja a totál koinkidencia spektrumot (valamennyi sorozatra történt szummázás után) és a singles spektrumot.





39. ábra. a) Totál koincidenencia spektrum (véletlen + valódi) valamennyi sorozatra történt összegzés után; b) A  $^{11}\text{C}$  singles gamma-spektruma

#### 6.4.2 Korrekció a Compton-eloszlásra a szcintillációs spektrumban

Mint ismeretes egy monoenergetikus gamma-sugárzás szcintillációs spektruma egy közelítőleg Gauss-eloszlású csúcsból (az ún. foto- vagy teljes energiájú csúcs) és egy egészen a legkisebb energiáig terjedő folytonos farokból áll. Ez utóbbi az ún. Compton-eloszlás. Ha a gamma-sugárzás folytonos energia eloszlású, a szcintillációs spektrum a monoenergetikus sugárzáshoz tartozó előbbieken vázolt eloszlástípusok sokaságának a szuperpozíciója lesz.

A Compton-eloszlás jelenlétének kettős hatása van a folytonos energia eloszlású gamma sugárzás szcintillációs spektrumában. Az egyik, hogy csökkenti egy adott energiának megfelelő csatornában az impulzus-számot a szóban forgó energiának a tényleges sugárzásban képviselt relatív intenzitásához képest. Ez az effektus a fotocsúcs hatások korrekciójában lesz figyelembe véve. A másik hatásra pedig, ami



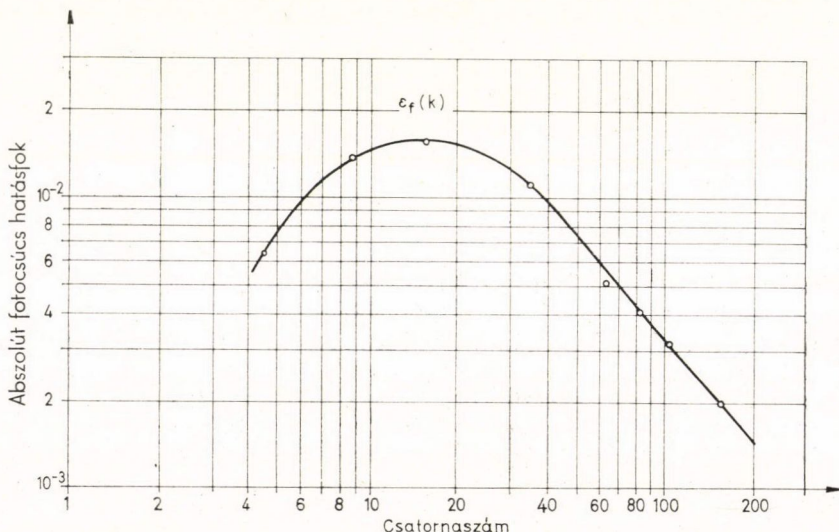
azt eredményezi, hogy a kisebb energiákhoz tartozó intenzitás megemelkedik a nagyobb energiáktól származó Compton-eloszlás miatt, az ún. Compton-korrekciónál korrigálunk.

A korrekció végrehajtásához első lépésként a Compton-él (a Compton-eloszlás vége a nagy energiák felé) elhelyezkedését,  $k_c$ , és a Compton-eloszlás—fotocsúcs intenzitás viszonyt,  $C/P$ , határoztuk meg kísérletileg a fotocsúcs elhelyezkedésének függvényében monoenergetikus gamma-spektrumok ( $^{57}\text{Co}$ ,  $^{203}\text{Hg}$ ,  $^{51}\text{Cr}$ ,  $^{11}\text{C}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{54}\text{Mn}$ ) felvétele alapján.

Ismerve a fenti kiegészítő adatokat és feltételezve, hogy a Compton-eloszlás a Compton-éltől lefelé közelítőleg azonos magasságú, egy Odra 1013 elektronikus számítógép segítségével a következő eljárást végeztük el. Kiindulva attól a csatornától, amelyik a kísérletileg általunk még vizsgált legnagyobb energiának felelt meg, az egyes csatornákhöz tartozó  $N_{\text{koinc}}(k)$  értéket megszoroztuk a megfelelő  $C/P$  viszsonnyal és amit így kaptunk, azt pedig a megfelelő  $k_c$ -vel. Az így adódó érték lett a  $k_c$ -nél kisebb energiájú spektrum tartományban a Compton-korrekció egyik (azaz egy magasabban fekvő csatornától származó) komponense. A teljes korrekciót egy adott csatornára minden megfelelően magasabban fekvő csatornától eredő komponens összegzéséből kaptuk.

Hogy a korrekciót még pontosabbá tegyük, az eljárást ténylegesen úgy végeztük, hogy az egyes csatornában az alacsonyabban fekvő csatornák korrigálására a már korrigált  $N_{\text{koinc}}(k)$  értékeket használtuk, ahol már egyáltalán korrigált értékek rendelkezésre álltak. Pl. konkrétan a  $^{11}\text{C}$  esetében a 48. csatornában kezdtük meg a korrigálási eljárást, innen haladtunk lefelé. A 48-hoz tartozó  $k_c$  (vagyis a Compton-eloszlás kezdete) 33. A 33. csatornától lefelé tehát már a korrigált  $N_{\text{koinc}}(k)$  értékekkel korrigáltunk a kisebb energiáknál és így tovább.

A teljes Compton-korrekció maximális értéke pl. a  $^{11}\text{C}$  esetében kb. 10% volt az adott mérési körülmények között.



40. ábra. A bécsi standardok felhasználásával kísérletileg meghatározott fotocsúcs hatások görbe a differenciális BFS-i spektrum mérésekben



### 6.4.3. Korrekció a fotocsúcs hatásfokra

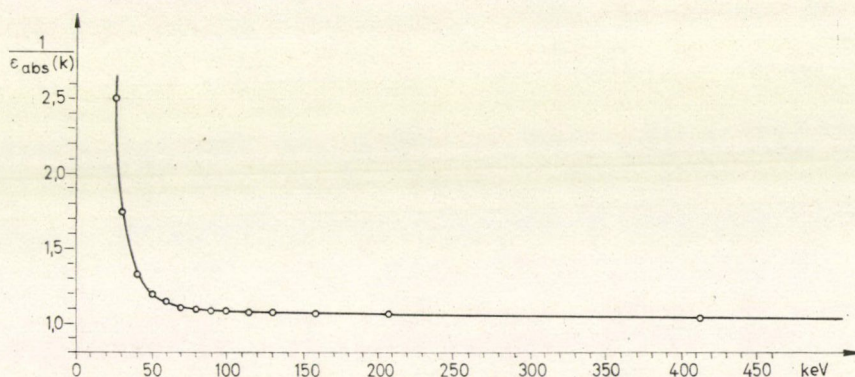
A gamma-detektor abszolút fotocsúcs hatásfoka erősen függ az energiától. Ezért amikor a mért impulzus eloszlásból visszaállítjuk az eredeti spektrumot, ez a korrekció igen jelentős lesz, különösen nagyobb energiáknál.

Méréseinkben a fotocsúcs hatásfokot kísérletileg határoztuk meg a  $^{11}\text{C}$ -re vonatkozó vizsgálatokban az  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{203}\text{Hg}$ ,  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{147}\text{Cs}$  és  $^{54}\text{Mn}$  standard források segítségével, amelyeket Bécsből, a Nemzetközi Atomenergia Ügynökségtől kaptunk. Ezeknek az aktivitása 1-től 3%-ig terjedő pontossággal van bemérve. Az általunk felvett fotocsúcs hatásfok görbe pontosságát mégsem ez határozza meg, hanem részben a fotocsúcs és a Compton-eloszlás elválasztásából eredő hiba a standardok gamma-spektrumában, részben (és főleg) a mért pontok (a standardok) relatív ritkasága az energia függvényében (lásd a 40. ábrát). Megjegyezzük, hogy ezek mellett általában a standardok felezési idejétől eredő hiba is elhanyagolható. A hatásfok görbe pontossága még az alacsony energiájú tartományban is jobb, mint  $\pm 10\%$ .

Megjegyezzük, hogy ezekkel a fotocsúcs hatásfok értékekkel elvégezve a korrekciót, egyúttal korrigálunk a gamma-abszorpcióra is a kristály foglalásban és részben a jó K-röntgen sugárzásának megszökésére is.

### 6.4.4. Korrekció a gamma-abszorpcióra

Hogy a forrásból eredő béta-részecskék ne jussanak el a gamma-detektorba és ne növeljék ott feleslegesen az impulzusszámot, a gamma-csatornában a kollimátor elé egy megfelelő vastagságú Al abszorbenst helyeztünk (a  $^{11}\text{C}$  mérésekben 1,5 mm), amint azt a 31. ábrán jeleztük.



41. ábra. Korrekciós faktor a gamma-abszorpcióra a  $^{11}\text{C}$  mérésekben

A gamma-sugárzás abszorpciójára ebben az Al-lemezben [145] és [146] teljes abszorpciós koefficiensre ( $\text{cm}^2/\text{g}$ -ban megadva) vonatkozó adatai alapján végeztük el a korrekciót. Az  $1/\epsilon_{\text{abs}}(k)$  korrekciós faktort a  $^{11}\text{C}$  esetére a 44. ábrán adjuk.

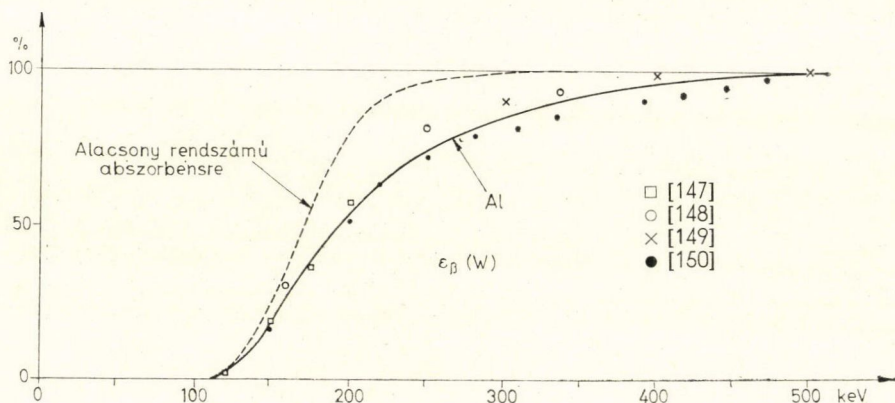
A gamma-sugárzás abszorpciója a forrás és a detektor közti légrétegben elhanyagolható.



#### 6.4.5. Korrekció a béta-abszorpcióra

A BFS-i spektrumra hatással van a béta-csatornában detektálandó béta-részecskék abszorpciója is, amely részben a forrás és a béta-detektor közti levegőben ( $13,2 \text{ mg/cm}^2$ ), részben a detektor előtti fényzáró rétegben ( $8,3 \text{ mg/cm}^2$  a  $^{11}\text{C}$  mérésben) következik be.

Az  $f_\beta(k)$  korrekciós faktor meghatározásához szükséges az  $\varepsilon_\beta(W)$  béta számlálási hatásfok ismerete (lásd részletesebben [144]-ben). Számos cikk van, amelyben különböző energiájú elektronokra közlik a százalékos transzmissziót az Al abszorbens vastagság függvényében [147–150]. Ezeknek a cikkeknek az adataiból konstruáltuk meg a transzmissziós görbét az energia függvényében a mi abszorbens vastagságunkra (42. ábra). Az irodalmi adatok szerint [148, 151] alacsonyabb rendszámú abszorbens esetén a transzmissziós görbe meredekebben emelkedik. Ezért rajzoltunk be a 42. ábrába egy meredekebb transzmissziós görbét is egy feltételezett Al-nál ala-



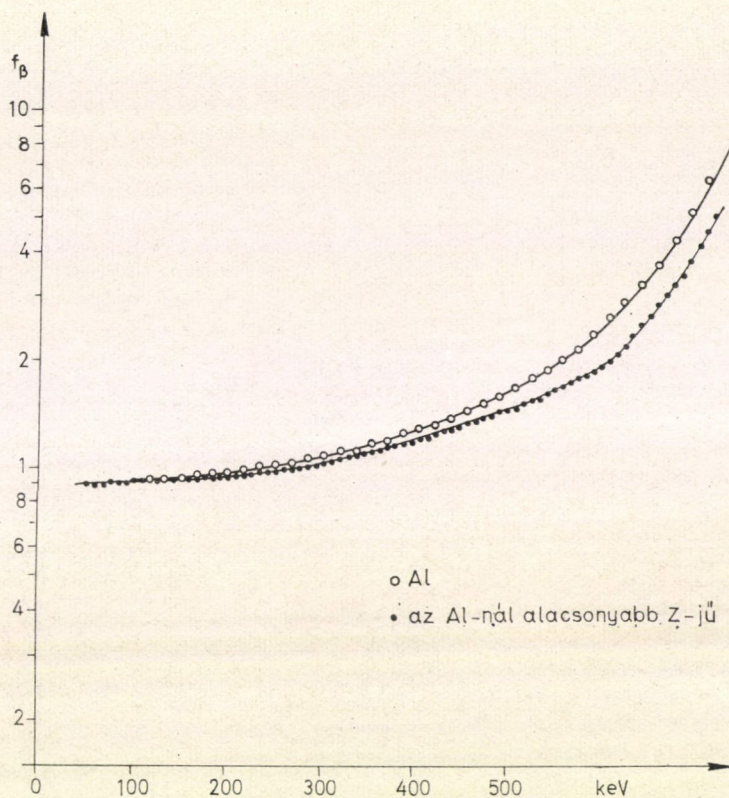
42. ábra. Elektron transzmissziós görbe az energia függvényében a  $^{11}\text{C}$  BFS-i spektrumára vonatkozó méréseinkben

csonyabb rendszámú abszorbensre, tekintve, hogy esetünkben a levegő és a papír átlagos  $Z$ -je kisebb, mint az alumíniumé. A pozitronok és elektronok közti különbség szintén befolyásolja kissé a transzmissziós görbe alakját [148].

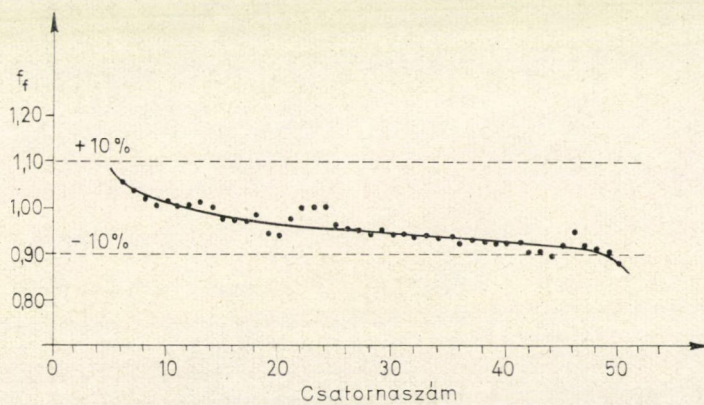
Az  $f_\beta(k)$ -t mindkét görbére (Al és alacsonyabb rendszámú abszorbens) kiszámítottuk és ezek értékei az energia függvényében a 43. ábrán láthatók. A két korrekciós faktor közti különbség függ az energiától. Abban a tartományban, ahol a  $^{11}\text{C}$  BFS-i spektrumát vizsgáltuk, néhány százalékot tesz ki (500 keV körül éri el a 10%-ot).

Az 42. ábra szerint a béta-csatorna méréseinkben  $\approx 115 \text{ keV}$ -nál vág le. A levágás az elektronika miatt lényegesen alacsonyabb energiánál következik be. Ezt kísérletileg alacsony röntgen-sugárzás ( $^{55}\text{Fe}$ -ből) detektálásával ellenőriztük.





43. ábra. Korrekciós faktor a béta-abszorpció miatt a  $^{11}\text{C}$  mérésekben



44. ábra. Korrekciós faktor a detektor véges energia feloldására a  $^{11}\text{C}$  mérésekben



#### 6.4.6. Korrekció a gamma-detektor véges energia feloldására

A feloldási korrekciót *Owen* és *Primakoff* módszerével végeztük [108], amely szerint

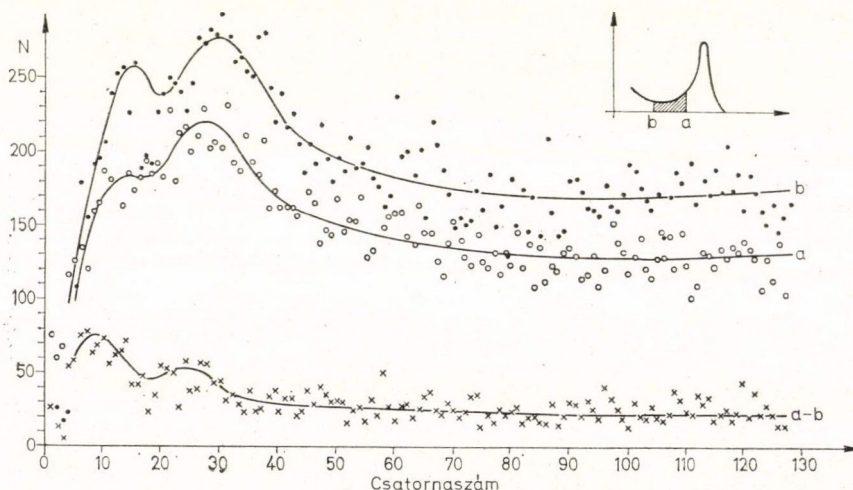
$$N_{\text{kor}}(k) = N_0(k) - \frac{\sigma^2}{2} N_0''(k),$$

ahol  $N_{\text{kor}}$  a feloldásra korrigált,  $N_0$  pedig az ebből a szempontból korrigálatlan érték (azaz olyan érték, amelyben az előző korrekciók már el lettek végezve).  $\sigma = 0,425 \Delta k_0$ , ahol  $\Delta k_0(k)$  a standard spektrumok alapján kísérletileg meghatározott félértékszélesség,  $N_0''(k)$  a korrigálatlan eloszlás második differenciálhányadosa, amelyet az ún. hét multiplier módszerrel [109] határoztunk meg.

A 44. ábrán az  $f_f(k) = \frac{N_{\text{kor}}}{N_0}$  korrekciós faktor értékét tüntettük fel az energia függvényében. Amint láthatjuk a korrekció értéke általában néhány %, csak a szélső értékeknél közelíti meg, illetve éri el a 10%-ot.

#### 6.4.7. Korrekció a koincidencia hatásokra

A jelen mérésekben koincidencia körként egy átfedési típusú idő-amplitúdó konvertert használtunk. A véletlen koincidencia szám csökkentésére kénytelenek voltunk az időspektrumban úgy beállni, hogy a valódi koincidenciák számában is veszteség lépett fel (lásd a 45. ábrán a jobb sarokban a  $^{22}\text{Na}$ -nak megfelelő időspektrumot és az „a”-val jelölt beállást). Ennek a veszteségnek a mértékét a  $^{22}\text{Na}$  béta-gamma koincidenciában felvett időspektrumával lehetett ellenőrizni. Felvéve a totál és (megfelelő késleltetéssel) a véletlen időspektrumot, a kettő különbsége



45. ábra. A  $^{22}\text{Na}$  pozitronokkal kapzott gamma-spektrumának alacsonyabb energiájú része különböző beállásnál az időspektrumban (véletlen koincidencia-spektrum minden esetben kivonva). A jobb felső sarokban a beszűrás időspektrumot és a különböző beállításokat mutatja



adta a valódi időspektrumot. Ha tudjuk, hogy a BFS-i spektrumra vonatkozó méréseinkben hol állt a diszkriminátorszint az időspektrumban, akkor az előbbi valódi időspektrumban a területarányokból a veszteség mértéke megbecsülhető.

Méréseink korrigálása szempontjából azonban fontosabb tudni, hogy ez a veszteség az energia-spektrumban hogyan oszlik meg. Ezt a következőképpen határoztuk meg.  $^{22}\text{Na}$ -vel felvettük a pozitronokkal kapuzott gamma-spektrumot különböző beállásnál az időspektrumban, és pedig úgy beállítva, ahogy a BFS-i spektrum vizsgálatánál álltunk (45. ábra „a” beállítás), továbbá úgy, hogy már semmi veszteség ne legyen valódi koincidencia impulzusokban („b” beállítás; azt különben, hogy ez a pont hol van azt az előző bekezdésben leírt, az időspektrumon végzett mérésekből állapíthatjuk meg). Végeztünk azután egy olyan mérést is, amelyben differenciálisan álltunk rá az (a—b) tartományra az időspektrumban. Ebben az esetben a hibahatáron belül az előbbi két spektrum különbségét kellett kapnunk az energia-spektrumban. Minden előbbi spektrum esetében mértük külön a véletlen spektrumot is és a 45. ábrán látható spektrumokból a véletlen eloszlások már le vannak vonva.

Az ábrán látható spektrumokból az  $f_c(k) = 1/\varepsilon_{\text{koinc}}(k)$  korrekciós faktort a következőképpen kapjuk:

$$f_c(k) = 1 + \frac{N_{a-b}(k)}{N_a(k)},$$

ahol  $N_{a-b}(k)$  az impulzusszám az „a—b” görbén,  $N_a(k)$  ugyanaz az „a” görbén.

Amint láthatjuk ez a korrekció elég nagy, általában 20—30 %, alacsony energiáknál még jóval nagyobb és hibája is nagy, úgy, hogy a korrekciók hibájához a BFS-i spektrum kiértékelésénél innen jön a döntő hozzájárulás.

#### 6.4.8. Kiegészítő korrekciók, ellenőrző számítások és mérések

Az előbbieken leírtuk a Compton-korrekciós eljárást. Ebben nem vettük figyelembe, hogy a BFS-i spektrum kísérletileg nem vizsgált részének (475 keV-től a 968 keV-os maximális energiáig) lehet kisebb befolyása a Compton-eloszláson keresztül a spektrum vizsgált tartományára, különösen annak végső szakaszára.

Ezt a kisebb hatást a *kiegészítő Compton-korrekcióval* vettük figyelembe. Ennél először is a spektrum kísérletileg nem vizsgált tartományában az elméleti spektrumot konvertáltuk kísérleti impulzus eloszlássá, ellenkező előjellel alkalmazva az egyes korrekciókat (fotocsúcs hatások, gamma-abszorpció, beta-abszorpció). Az így kapott spektrumra hasonló eljárást alkalmazva, mint azt a Compton-korrekciónál tettük, megkaptuk a kiegészítő Compton-korrekció értékeit. Ezek legfeljebb néhány százalékot tettek ki a vizsgált BFS-i spektrum nagyobb energiájú felében ( $\approx 230$ -tól 475 keV-ig) és itt a végső BFS-i spektrumnál figyelembe is lettek véve.

A spektrum legkisebb energiájú tartományában ( $< 100$ ) a *jód K-röntgen sugárzásának megszökése* két különböző hatással jár, hasonlóan a már tárgyalt Compton-eloszláshoz. Egy részről kibocsátja a fotocsúcsot, másrésztől 29 keV-tal lejjebb növeli a megfelelő impulzusszámot.

Ami az első effektust illeti, az — mint azt már említettük — a fotocsúcs hatások korrekciónál lett figyelembe véve. A másodikkal kapcsolatban a helyzet a következő.

A legalacsonyabb energia, amelynél mi a BFS-i sugárzást (a  $^{11}\text{C}$  esetében) tanulmányoztuk, 26 keV. Ide a megszökési hozzájárulás  $26 + 29 = 55$  keV-től jön. Az irodalomnak [152, 153] és a  $^{241}\text{Am}$ -ra vonatkozó ilyen jellegű ellenőrző méréseink-



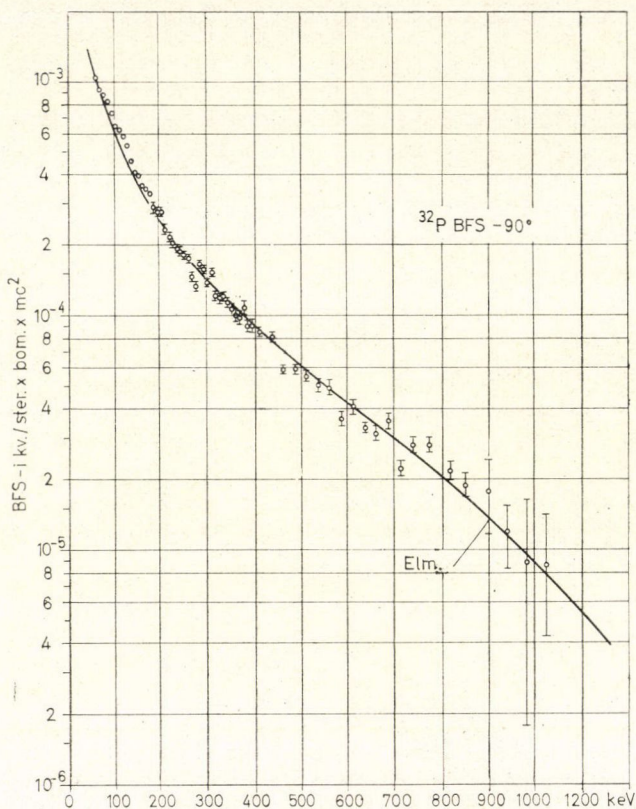
nek megfelelően, BFS-i spektrumunkban 26 keV-nál ennek a korrekciónak az értéke legfeljebb 5% lehet, ha figyelembe vesszük a spektrum igen meredek emelkedését is ebben a tartományban. 26 keV-tól felfelé ( $\approx 100$  keV-ig) pedig még kevesebb, mint 26 keV-nél és így ezt a korrekciót méréseinkben elhanyagoltuk.

A szcintillációs spektrumnak szintén jellemző összetevője az ún. *visszaszórási csúcs*, amelynek az intenzitása a mérés geometriájától függően jelentősen változhat.

A visszaszórási csúcs helye bizonyos hatások között függ a megfelelő fotocsúcs helyétől.

A visszaszórási csúcs hatását mért BFS-i spektrumunkban a következőképpen becsültük. Alakját egy háromszöggel közelítettük, amelynek magasságát (relatív intenzitását a fotocsúchhoz képest) és alapjának hosszát a standard spektrumokból vettük. Ezeket az adatokat, valamint a konvertált elméleti spektrumot felhasználva az adódott, hogy ettől az effektustól a kb. 100–250 keV tartományban legfeljebb egy néhány %-os korrekció eredhet, amelyet méréseinkben elhanyagolhatónak ítéltünk.

Komoly megfontolást igényelt a *labor falain fellépő szórás* — főleg az annihilációs sugárzás jelenléte miatt — méréseinkben. Mérési elrendezésünkben a falak távolsága a forrástól legalább kb. 1,5–2 m volt. Egyszerű geometriai meg-



46. ábra. A  $^{32}\text{P}$  differenciális BFS-i spektrum összehasonlítva a KUB Nilsson elméleti eloszlással

fontolásokból az adódik, hogy a falon történt szórásokból eredő valódi koincidenciák száma legalább két nagyságrenddel kisebb mint a BFS-i spektrum intenzitása az egész vizsgált tartományban.

A két számlálót egymástól vastag ólomtömb választja el. Nagyságrendekkel kisebb sugárzás, különösen kis energiáknál, mégis átjuthat ezen az ólom árnyékoláson is. A két számláló közti ólomtömbön átjutó sugárzás intenzitásának az ellenőrzésére a következő kísérletet végeztük. Az ólom árnyékoláson belül, közvetlenül a béta-detektor elé egy  $^{137}\text{Cs}$  preparátumot helyeztünk és mértük a singles spektrumot a gamma-csatornában. Ezt azután összehasonlítva a BFS-i spektrumban mért



koincidenencia impulzusszámmal megállapítottuk, hogy ha van is egy ilyen jellegű hozzájárulás a BFS-i spektrumhoz, az csak 220—230 keV alatt lehet jelentősebb, de itt is biztosan kisebb, mint 5%.

Ellenőriztük a *holt idő korrekció* nagyságát is. A béta-csatornára vonatkozólag katód-sugár oszcilloszkóppal mérve a holt időt, ezt kb. 3  $\mu$ sec-nak találtuk. Ebből 10<sup>7</sup>/2000 sec impulzusszámmal az ismeretes összefüggés alapján holt idő korrekcióra  $\approx 2\%$  adódik, ami elhanyagolható. A megfelelő korrekció még kevesebb a gamma-csatornában.

Esetleges *utó-impulzusok* megnövelhetik a béta-impulzusszámot, ami a kísérleti spektrum lefelé tolódásához vezetne, mivel a koincidenencia impulzusszám per a béta-impulzusszám, azaz a béta-bomlásonkénti spektrális eloszlás az, amit az elmélettel összehasonlítottunk. Katód-sugár oszcilloszkóppal végzett vizsgálatok azt mutatták, hogy a jelen mérési körülmények között *utó-impulzusok* nem jelentkeztek.

Zavaró effektusok eredhetnek a *levegőben, továbbá a forrás anyagában és hátlapjában keletkező külső fékezési sugárzástól* is. Ami a levegőt és a forrás anyagát illeti [102] és [86]-ban részletes vizsgálatokat végeztek ezekre vonatkozóan és ha ezeket az eredményeket saját mérési feltételeinkre vonatkoztatjuk, megállapíthatjuk, hogy a levegő és a forrás vastagság szerepe esetünkben is elhanyagolható. Ha a térszög viszonyokat és a visszaszórási faktor konkrét értékét figyelembe vesszük, ugyanezt mondhatjuk a kb. 9 mg/cm<sup>2</sup> Cu hátlap hatásáról is. Legfeljebb a 100 keV alatti tartományban okozhat ez utóbbi effektus néhány százalékos korrekciót.

Az a módszer, ahogy a singles spektrum normálásával korrigáltunk a *véletlen koincidenenciákra* feltétlenül bizonyos hibával jár, mivel a totál koincidenencia spektrumában az 511 keV-os csúcs helyén van jelen még valódi koincidenencia impulzusszám is. Ez a tény azonban a kísérletileg vizsgált spektrum végén (400 keV körül) legfeljebb néhány % eltérést okozhat. Ugyanezt mondhatjuk a normálásból eredő hibára vonatkozólag is.

Végigtekintve valamennyi korrekciót és zavaró effektust, a <sup>11</sup>C BFS-i spektrumában 200—250 keV körül jelentkező felugrást, mint már 6.1-ban is említettük, nem tudjuk egyértelműen magyarázni. Esetleg több különböző zavaró effektus és korrekciós hiba szuperpozíciójáról van szó és az elhanyagolt koincidenencia háttér is adhat hozzájárulást.

Végül megemlíti, hogy mérési elrendezésünket és kiértékelési eljárásunkat a <sup>32</sup>P BFS-i spektruma megméréseivel ellenőriztük (46. ábra). Mint látható az ábrán az egyezés az elmélet és kísérlet között kielégítő, hasonlóan ahhoz, ahogy más szerzők hasonló módszerrel korábban megállapították [93, 102].

#### IRODALOM

1. D. Berényi, Nuclear Physics 48, 121, 1963.
2. D. Berényi, Atomki Közlemények 7, 179, 1965.
3. Berényi D., Fizikai Szemle 16, 21, 1966.
4. D. Berényi, Revs. Mod. Phys. 40, 390, 1968.
5. D. Berényi, Acta Phys. Hung. 22, 25, 1967.
6. P. Depommier, Proc. Conf. on the Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, Hungary, July 15—18. 1968. Eötvös L. Physical Society, Budapest. p. 202.
7. R. Nataf et R. Bouchez, Journ. Phys. Rad. 13, 81, 1952.
8. R. Nataf et R. Bouchez, Journ. Phys. Rad. 13, 190, 1952.
9. R. Bouchez, Physica 18, 1171, 1952.



10. R. Bouchez and P. Depommier, Rep. Prog. Phys. 23, 395, 1960.
11. D. Berényi and L. Kazai, Nucl. Physics 61, 657, 1965.
12. Nuclear Data Sheets, National Academy of Sciences — National Research Council, Washington, 4, 51, 1959.
13. P. Kienle and R. E. Segel, Phys. Rev. 114, 1554, 1959.
14. B. G. Pettersson, J. H. Hamilton and J. E. Thun, Nuclear Physics 22, 131, 1961.
15. J. H. Hamilton, L. M. Langer and D. R. Smith, Phys. Rev. 123, 189, 1961.
16. H. Daniel, O. Mehling, P. Schmidlin, D. Schotte und E. Thummernicht, Zeits. Phys. 179, 62, 1964.
17. M. Sakai, J. L. Dick, W. S. Anderson and J. D. Kurbatov, Phys. Rev. 95, 101, 1954.
18. P. F. Zweifel, Phys. Rev. 96, 1572, 1954.
19. P. F. Zweifel, Phys. Rev. 107, 329, 1957.
20. Berényi D., Kazai L., Scharbert T. és Vatai E., Atomki Közl. 6, 101, 1964.
21. J. W. Blue and E. Bleuler, Phys. Rev. 100, 1324, 1955.
22. B. von Nooijen, J. Konijn, A. Heyligers, J. F. von der Brugge and A. H. Wapstra, Physica 23, 753, 1957.
23. B. van Nooijen, H. van Krugten, W. J. Wieseahn and A. H. Wapstra, Nuclear Physics 31, 406, 1962.
24. J. Horváth, Experientia 5, 112, 1949.
25. A. Szalay and D. Berényi, Izv. Akad. Nauk SzSzSR Fiz. Szer. 22, 877, 1958.
26. A. Szalay and D. Berényi, Acta Phys. Hung. 10, 57, 1959.
27. D. Berényi, Phys. Letters 3, 142, 1962.
28. C. S. Cook and F. M. Tomnovec, Phys. Rev. 104, 1407, 1956.
29. R. Schönbeg, M. Schumacher and A. Flammersfeld, Zeits. Physik 192, 305, 1966.
30. S. Juhász, Cs. Újhelyi, D. Berényi and F. Illés, Proc. Conf. Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays. Debrecen, July 15—18, 1968. Eötvös L. Phys. Soc., Budapest, 1968. p. 438.
31. S. Juhász, Cs. Újhelyi, D. Berényi and F. Illés, Acta Phys. Hung., közlése előkészületben.
32. H. C. Pauli, Preprint, Basel, 1967.
33. C. P. Bhalla, Phys. Rev. 157, 1136, 1967.
34. L. A. Borisoglebsky, Jadernaja Fizika 5, 379, 1967.
35. R. S. Hager and E. C. Seltzer, AEC Research and Development Report, CALT-63-60, California Institute of Technology, Pasadena, Calif., June, 1967.
36. M. E. Rose, Internal Conversion Coefficients. North—Holland Publ. Co., Amsterdam, 1958.
37. J. L. Wolfson, J. J. H. Park and L. Yoffe, Nuclear Physics 39, 613, 1962.
38. Berényi D. és Illés F., Atomki Közlemények 3, 83, 1961.
39. Illés F. és Berényi D., Atomki Közlemények 3, 91, 1961.
40. Schadek J., Berényi D. és Illés F., Atomki Közlemények 3, 105, 1961.
41. Illés F. és Berényi D., Atomki Közlemények 6, 157, 1964.
42. F. Illés and D. Berényi, Acta Phys. Hung. 18, 265, 1965.
43. Cs. Újhelyi and D. Berényi, közlése előkészületben.
44. H. Slätis, Nucl. Instr. and Meth. 16, 51, 1962.
45. C. E. Johnson, J. F. Schooley and D. A. Shirley, Phys. Rev. 120, 1777, 1960.
46. Y. Y. Chu and M. L. Perlman, Phys. Rev. 135, B319, 1964.
47. M. Bogdanovic, M. Mladjenovic and R. Stepic, Nuclear Physics A106, 209, 1968.
48. D. Berényi, Cs. Újhelyi and I. Fehér, Phys. Letters 18, 293, 1965.
49. D. Berényi, Atomki Közlemények 7, 183, 1965.
50. P. W. Dougan, K. W. D. Ledingham and R. W. P. Drever, Phil. Mag. 7, 1223, 1962.
51. D. Berényi, Phys. Letters 2, 332, 1962.
52. D. Berényi, Acta Phys. Hung. 16, 101, 1963.
53. D. Berényi, Proc. Int. Conf. Role of Atomic Electrons in Nuclear Transformations. Warsaw, 24—28 September, 1963. Nuclear Energy Information Center, Warsaw, 1965. p. 609.
54. R. E. Cutkosky, Phys. Rev. 95, 1222, 1954.
55. P. Lipnik, G. Pralong and J. W. Sunier, Nuclear Physics 59, 504, 1964.
56. Y. Koh, O. Miyatake and Y. Watanabe, Nuclear Physics 32, 246, 1962.
57. Y. Koh, Proc. Int. Conf. on the Role of Atomic Electrons in Nuclear Transformations, Warsaw, 24—28, September 1963. Nuclear Energy Inf. Center, Warsaw, 1965. p. 637.
58. R. J. Glauber and P. C. Martin, Phys. Rev. 104, 158, 1956.
59. P. C. Martin and R. J. Glauber, Phys. Rev. 109, 1307, 1958.



60. P. Morrison and L. I. Schiff, Phys. Rev. 58, 24, 1940.
61. H. Bradt, P. C. Gugelot, O. Huber, H. Medicus, P. Preiswerk, P. Scherrer und R. Steffen, Helv. Acta Phys. 19, 222, 1946.
62. M. H. Biavati, S. J. Nassiff and C. S. Wu, Phys. Rev. 125, 1364, 1962.
63. R. L. Robinson and P. H. Stelson, Bull. Am. Phys. Soc. 10, 245, 1965.
64. B. A. Zon és L. L. Rapoport, Jadernaja Fizika 7, 528 (1968)
65. J. Zylicz, Proc. Conf. on the Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, Hungary, July 15—18, 1968. Eötvös L. Physical Society, Budapest, p. 123.
66. Y. Koh, magánközlés.
67. W. R. Pierson, Phys. Rev. 159, 951, 1967.
68. G. H. Aston, Proc. Camb. Phil. Soc. 23, 935, 1927.
69. J. K. Knipp and G. E. Uhlenbeck, Physica 3, 425, 1936.
70. F. Bloch, Phys. Rev. 50, 272, 1936.
71. C. S. W. Chang and D. L. Falkoff, Phys. Rev. 76, 365, 1949.
72. L. Madansky, F. Lipps, P. Bolgiano and T. H. Berlin, Phys. Rev. 84, 596, 1951.
73. S. B. Nilsson, Ark. för Fys. 10, 467, 1956.
74. R. R. Lewis, Jr., and G. W. Ford, Phys. Rev. 107, 756, 1957.
75. L. Spruch and W. Gold, Phys. Rev. 113, 1060, 1959.
76. R. Vinh-Mau, Nuovo C.; 19, 609, 1961.
77. G. Felsner, Phys. Verhandlungen 13, 394, 1962.
78. G. Felsner, Zeits. f. Phys. 174, 43, 1963.
79. F. Janouch and M. Havranek, Compt. Rend. Congrès International de Physique Nucléaire. Paris, 2—8 Juillet 1964. Éd. Centre National de la Recherche Sci., Paris, 1964. p. 1170.
80. P. X. Yem, C. R. Acad. Sci. Paris, 260, 3381, 1965.
81. P. X. Yem, Nuclear Physics 85, 442, 1966.
82. P. X. Yem, Thèse, Fac. Sci. Univ., Paris, 1966.
83. D. Gebhart, Dissertation, Naturw. Fak. F. Alexander Univ., Erlangen, 1967.
84. D. Gebhardt, Nuclear Physics A107, 593, 1968.
85. D. Gebhardt, Nuclear Physics A115, 207, 1968.
86. J. K. Bienlein, G. Graf, W. Kreische, W. Lambert und G. Loos, Nuclear Physics A92, 549, 1967.
87. B. Persson, Nuclear Physics 67, 121, 1965.
88. B. Persson, Proc. Conf. on the Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, July 15—18, 1968. Eötvös L. Physical Society, Budapest, 1968. p. 142.
89. M. A. Hakeem and M. Goodrich, Nuclear Physics 31, 322, 1962.
90. K. Lidén and N. Starfelt, Phys. Rev. 97, 419, 1955.
91. K. Narasimhamurthy and S. Janananda, Nuovo Ci. 46, 217, 1966.
92. K. A. Korotkov and A. M. Chernikov, Izv. AN SzSzSzR, Szer. fiz. 24, 899, 1960.
93. B. Persson, Nuclear Physics 55, 49, 1964.
94. K. A. Korotkov and A. P. Shumeyko, Izv. AN SzSzSzR, Szer. fiz. 29, 2243, 1965.
95. K. A. Korotkov and V. I. Kryshkin, Izv. AN SzSzSzR, Szer. fiz. 29, 2247, 1965.
96. H. Langevin-Joliot, Ann. de Physique 2, 16, 1957.
97. M. Goodrich and W. B. Payne, Phys. Rev. 94, 405, 1954.
98. G.-A. Renard, Journ. Phys. Radium 14, 261, 1953.
99. H. Langevin-Joliot, Compt. rend. 241, 872, 1955.
100. H. Langevin-Joliot, Compt. rend. 241, 1286, 1955.
101. H. Langevin-Joliot, Compt. rend. 242, 1971, 1956.
102. B. Persson and S. A. E. Johansson, Nucl. Phys. 12, 432, 1959.
103. G. R. White, Nat. Bur. Standards, Report, No. 1003, 1952.
104. E. A. Wolicki, R. Jastrow and F. Brooks, Naval Res. Lab. Report, NRL-4833, 1956.
105. W. Kreische, W. Lampert und G. Loos, Nuclear Instr. Meth. 42, 188, 1966.
106. K. Lidén and N. Starfelt, Ark. för Fys. 7, 427, 1954.
107. W. R. Dixon and J. H. Aitken, Can. Journ. Phys. 36, 1624, 1958.
108. G. E. Owen and H. Primakoff, Phys. Rev. 74, 1406, 1948.
109. J. P. Palmer and L. J. Laslett, AEC Report, ISC-174, Ames Laboratory, 1950. p. 35.
110. W. Kreische, W. Lampert und G. Loos, Nuclear Physics A107, 601, 1968.
111. D. Berényi and D. Varga, Proc. Conf. on the Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, Hungary, July 15—18, 1968. Eötvös L. Physical Society, Budapest, 1968. p. 176.
112. D. Berényi and D. Varga, Nuclear Physics, A 138 685, 1969.



113. B. Sz. Dzselepev i L. K. Peker, Szchemü raszpada radioaktivnűch jader. A < 100. Izd. „Nauka”, Moszkva—Leningrad, 1966.
114. B. Persson and J. Reynolds, Nuclear Physics 66, 439, 1965.
115. R. Quivy et J. Franeau, Journ. de Physique 26, 1965.
116. M. J. Canty, W. F. Davidson and R. D. Connor, Nuclear Physics 85, 317, 1966.
117. B. Sz. Dzselepev i L. K. Peker, Szchemü raszpada radioaktivnűch jader. Izd. AN SzSzSzR, Moszkva—Leningrad, 1958.
118. L. Madansky and F. Rasetti, Phys. Rev. 83, 187, 1951.
119. T. B. Novey, Phys. Rev. 89, 672, 1953.
120. P. Bolgiano, L. Madansky and F. Rasetti, Phys. Rev. 89, 679, 1953.
121. A. Michalowicz, Journ. Phys. Radium 15, 156, 1954.
122. J. E. Thun, B. G. Pettersson and K. Siegbahn, Nuclear Physics 18, 131, 1960.
123. J. E. Thun, W. D. Hamilton, K. Siegbahn and K. E. Eriksson, Ark. f. Fys. 22, 565, 1962.
124. G. Loos, W. Kreische, W. Lampert and H.-J. Trebst, Proc. Conf. on the Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, July 15—18, 1968. Eötvös Lóránd Phys. Soc., Budapest, 1968. p. 182.
125. Berényi D., Scharbert T. és Vatai E., Atomki Közlemények 9, 267, 1967.
126. D. Berényi, T. Scharbert and E. Vatai, Proc. Symposium on Nuclear Beta-Decay and Weak Interactions, Zagreb, September 25—28, 1967. Zagreb, 1968. p. 227.
127. D. Berényi, T. Scharbert and E. Vatai, Proc. Conf. on Electron Capture and Higher Order Processes in Nucl. Decays, Debrecen, July 15—18, 1968. Eötvös L. Phys. Soc., Budapest, 1968. p. 170.
128. D. Berényi, T. Scharbert and E. Vatai, Nuclear Physics A124, 464, 1969.
129. R. Akselson and B. Persson, Proc. Conf. on Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays. Debrecen, July 15—18, 1968. Eötvös L. Phys. Soc., Budapest. 1968. p. 187.
130. J. K. Bienlein, Thesis. University of Erlangen-Nürnberg, 1963.
131. J. K. Bienlein and F. Pleasonton, Proc. Int. Conf. on Role of Atomic Electrons in Nuclear Transformations. Warsaw 24—28 September, 1963. Nuclear Energy Inf. Center, Warsaw, 1965. p. 670.
132. J. K. Bienlein and F. Pleasonton, Nuclear Physics 68, 17, 1965.
133. D. Berényi, E. Vatai, T. Scharbert and E. Brücher, Proc. Conf. on Electron Capture and Higher Order Processes in Nucl. Decays. Debrecen, July 15—18, 1968. Eötvös L. Phys. Soc., Budapest, 1968. p. 192.
134. D. Berényi, T. Scharbert, E. Vatai and E. Brücher, Nuclear Physics, 137, 80, 1969.
135. N. Starfelt and Cederlund, Phys. Rev. 105, 241, 1957.
136. T. Scharbert, D. Berényi and E. Vatai, Proc. Conf. on Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, July 15—18, 1968. Eötvös Lóránd Phys. Soc., Budapest, 1968. p. 196.
137. J. K. Bienlein and F. Pleasonton, Compt. Rend. Cong. Inter. Phys. Nucl. Paris, 1964. 5/C232.
138. S. Belletti, C. Manduchi, G. Nardelli and M. T. Russo-Manduchi, Nuovo Ci. 25, 254, 1962.
139. A. Michalowicz and R. Bouchez, J. Phys. Rad. 16, 578, 1955.
140. J. K. Bienlein and W. Kreische, Phys. Verland. 11, 61, 1960.
141. W. Kreische, Zeits. Phys. 177, 274, 1964.
142. K. Narasimhamurty and S. Jnanananda, Proc. Phys. Soc. 90, 109, 1967.
143. R. A. Ricci, Physica 24, 297, 1958.
144. D. Berényi, T. Scharbert and E. Vatai, Acta Phys. Hung., közlés alatt.
145. J. H. McCrary, E. H. Plassmann, J. M. Puckett, A. L. Conner and G. W. Zimmermann, Phys. Rev. 153, 307, 1967.
146. M. Wiedenbeck, Phys. Rev. 126, 1009, 1962.
147. I. Carlvik, Ark. för Phys. 6, 1, 1952.
148. H. H. Seliger, Phys. Rev. 100, 1029, 1955.
149. B. N. C. Agu, T. Burdett and E. Matsukava, Proc. Phys. Soc. 71, 201, 1958.
150. D. Berényi and M. Osvay, Acta Phys. Hung. 15, 357, 1953.
151. B. N. C. Agu, T. A. Burdett and E. Matsukava, Proc. Phys. Soc. 72, 727, 1958.
152. J. B. Birks, The Theory and Practice of Scintillation Counting. Pergamon Press, London, 1964. p. 481.
153. J. H. Neiler and P. R. Bell, (in) Alpha-, Beta- and Gamma-Ray Spectroscopy. North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1965. Ed. by K. Siegbahn. p. 293.
154. E. Vatai, Acta Phys. Hung. 20, 217, 1966.
155. J. H. E. Mattauch, W. Thiele and A. H. Wapstra, Nuclear Physics 67, 1, 1965.



# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## A KVANTUMMECHANIKA ALKALMAZÁSA AZ ANOMÁLIS ZEEMAN-EFFEKTUS PROBLÉMÁJÁRA\*

W. HEISENBERG ÉS P. JORDAN

Uhlenbeck és Goudsmit az anomális Zeeman-effektus magyarázatára a forgó elektron Compton-féle hipotézisét alkalmazta. A jelen munka az ezen feltevéssel jellemzett atommodell kvantummechanikai viselkedését vizsgálja. Az eredmény: a Zeeman-effektus és a dublett-spektrumok finomszerkezete a mondott hipotézis segítségével teljes mértékben magyarázható.

Az atomi rendszerek mágneses viselkedésének tanulmányozása alapján tudjuk, hogy valamely ponttöltésekből álló atomi rendszernek a kvantummechanika törvényei szerint is mindenkor normális Zeeman-effektust kell mutatnia.

Az anomális Zeeman-effektus értelmezése céljából Uhlenbeck és Goudsmit azt a feltevést tette,<sup>1</sup> hogy minden egyes elektron  $\mathbf{m}$  mágneses momentum és egy ennek megfelelő  $\mathbf{s}$  mechanikai impulzusmomentum hordozója. A kapcsolatot  $\mathbf{m}$  és  $\mathbf{s}$  között az

$$\mathbf{m} = \frac{e}{mc} \mathbf{s} \quad (1)$$

összefüggés adja meg. A mágneses és mechanikai momentum hányadosa eszerint a ponttöltésekből álló atomi rendszerekre érvényes  $\frac{e}{2mc}$  értéktől egy kettes tényezőben különbözik. Itt nem kívánunk azzal foglalkozni, milyen érveket lehet felhozni az elektrodinamika szempontjából ezen hipotézis mellett vagy ellene. A következőkben inkább az Uhlenbeck—Goudsmit-modell kvantummechanikai viselkedését vizsgáljuk meg  $\mathbf{s}$  az eredményt összehasonlítjuk a tapasztalattal. Mint ismeretes, a korábban szokásos kvantumszabályok alkalmazása erre a modellre a tapasztalatnak ellentmondó eredményekhez vezetett.

1. *A modell Hamilton-függvénye.* A következőkben feltesszük, hogy egy  $-e$  töltésű,  $\mathbf{m}$  mágneses momentumú és  $\mathbf{s}$  impulzusmomentumú<sup>2</sup>  $\left(\mathbf{m} = \frac{e}{mc} \mathbf{s}\right)$  elektron

\* Megjelent: ZS. f. Phys. 37, 263, 1926.

<sup>1</sup> A forgó elektron hipotézise eredetileg A. Comptontól származik, Journ. Frankl. Inst., 192, 145, 1921. E hipotézis alkalmazása a Zeeman-effektus bennünket érdeklő problémájára E. Uhlenbeck és S. Goudsmit nevéhez fűződik, Naturwiss. 13, Heft 47, 1925.

<sup>2</sup> A Compton—Uhlenbeck—Goudsmit-féle hipotézis szerint az egyes elektronnak meghatározott saját-impulzusmomentum, mégpedig  $s^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 s(s+1)$ ;  $s = \frac{1}{2}$  tulajdonítandó. Mi azonban  $\mathbf{s}$ -et egyelőre meghatározatlannak hagyjuk meg, hogy a több elektron-mágnes összecsatolásával előálló multipletteket (triplett, kvartett stb.) is egyidejűleg tárgyalhassuk.



egy  $Z$ -szeres pozitív töltésű nehéz mag körül kering; ennek a mozgásnak az impulzusmomentumát jelölje  $\mathbf{k}$ . Perturbálja az elektron mozgását a  $\mathbf{H}$  külső mágneses tér. Mágneses szempontból ennek a modellnek a viselkedése nyilvánvalóan pontosan megegyezik a Pauli és Landé által javasolt modellével, amely oly nagy szolgáltatokat tett a komplex spektrumok formális rendszerezésével kapcsolatban. A több valencia-elektron együttes hatásaként fellépő finomszerkezet és Zeeman-effektus a legtöbb esetben visszavezethető a fent leírt modell finomszerkezetére és Zeeman-effektusára.

Az elektron mozgását — ha eltekintünk a relativitás befolyásától, a külső tér és az  $\mathbf{m}$  momentum hatásától — a hidrogén atom Pauli—Dirac-féle elmélete adja meg.<sup>3</sup>

A figyelembe veendő perturbációs energia három tag összege:

$$H = H_1 + H_2 + H_3.$$

1. A  $\mathbf{H}$  külső tértől eredő részt az ismert szabályok szerint

$$H_1 = \mathbf{H} \left( \frac{e}{2mc} \mathbf{k} \right) + \mathbf{H} \left( \frac{e}{mc} \mathbf{s} \right) = \frac{e}{2mc} \mathbf{H}(\mathbf{k} + 2\mathbf{s}) \quad (2)$$

adja meg.

2. Ha az elektron súlypontját nyugvónak, a magot az elektron körül keringőnek gondoljuk, úgy a mag az elektron helyén a

$$\mathbf{H}_i = \frac{eZ}{c} \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{v}}{r^3} = \frac{eZ}{mc} \frac{\mathbf{k}}{r^3}$$

mágneses teret kelti.

Ennek a térnek az  $\mathbf{s}$  impulzusmomentum  $\frac{e}{mc} \bar{\mathbf{H}}_i$  nagyságú Larmor-precessziója felel meg. Thomas<sup>4</sup> szerint azonban tekintetbe kell vennünk, hogy a Larmor-precesszió az ez az értéke csak az imént szemügyre vett rendszerben érvényes, abban, amelyben az elektron súlypontja nyugalomban van. Ahhoz, hogy a precessziót megkapjuk abban a rendszerben, amelyben a mag vagy helyesebben az egész atom súlypontja nyugszik, el kell végeznünk egy Lorentz-transzformációt. Az utóbbi, bennünket voltaképpen érdeklő rendszerben a Larmor-precesszióra így Thomas szerint az  $\frac{e^2 Z}{2m^2 c^2 r^3} \bar{\mathbf{k}}$  érték adódik. Ennek az értéknek a Hamilton-függvényben nyilvánvalóan a

$$H_2 = \frac{e^2 Z}{2m^2 c^2} \frac{\bar{\mathbf{k}}}{r^3} \mathbf{k} \mathbf{s} \quad (3)$$

tag felel meg.

3. A relativisztikus tömegváltozás Sommerfeld elmélete szerint

$$H_3 = -\frac{1}{2mc^2} \left[ W_0^2 + 2e^2 Z W_0 \frac{\bar{\mathbf{k}}}{r} + e^4 Z^2 \frac{\bar{\mathbf{k}}}{r^2} \right] \quad (4)$$

nagyságú járulékos energia felléptét eredményezi. A vonás az  $r$ -től függő tagok felett a perturbálatlan mozgásra képezett középértéket jelent. A következőkben

<sup>3</sup> W. Pauli jr. ZS. f. Phys. **36**, 336, 1926; P. Dirac, Proc. Roy. Soc. London **110**, 1926. március.

<sup>4</sup> L. H. Thomas, Nature **117**, 514, 1926.



feltesszük, hogy  $H$  perturbációs függvény a kvantummechanikában ugyanolyan alakú, mint a klasszikus mechanikában és elektrodinamikában. Ezt a feltevést azzal okolhatjuk meg, hogy a  $H$ -ban előforduló valamennyi mennyiség felcserélhető és így a korrespondencia-elv szerint  $H$  számára aligha jöhet tekintetbe az itt közöltől lényegesen eltérő alak. Az itt megadott perturbációs függvények kényszerítő erejű megalapozása nem lehetséges mindaddig, amíg rendelkezésünkre nem áll egy következetesen felépített kvantumelméleti elektrodinamika.

2. *A perturbáció-számítás gondolatmenete.* A most következő kvantummechanikai számítás során feltehetjük, hogy a perturbálatlan rendszerben  $\mathbf{k}$  és  $\mathbf{s}$  abszolút értéke kvantált, azok tehát diagonális mátrixok. Ez a feltevés

$$|\mathbf{k}|^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 k(k+1)$$

abszolút értékére vonatkozóan jogosulatlannak látszhat, minthogy a perturbálatlan rendszerben fennáll  $k$  ismert elfajulása. Minthogy azonban magában  $H$ -ban csupán  $\mathbf{k}$  lép fel, a  $\mathbf{k}$ -hoz konjugált perihélium-hossz azonban nem,  $H$  tekintetbe vételekor  $|\mathbf{k}|$  feltételezett kvantáltsága mégis csak be fog következni. Ez azt jelenti fizikailag, hogy az itt vizsgálandó modell szerint a hidrogén Zeeman-effektusa az alkáli atomokéval teljes mértékben analóg. Az alkáli atomok esetében  $|\mathbf{k}|$ -t már a többi elektronnal való kölcsönhatás meghatározza. Hasonló megfontolást végezhetünk az atom  $\mathbf{M}$  össz-impulzusmomentumának a tér irányába eső  $M_z$  komponensére vonatkozóan.

Az eredeti rendszer  $M_z = \frac{h}{2\pi} m$ -re vonatkozóan elfajult ugyan, minthogy azonban a  $H$  perturbációs energiában csak  $m$  lép fel, az  $m$ -hez konjugált szögváltozó azonban nem, így  $H$  révén  $M_z$  kvantálása mégis csak bekövetkezik. Számításainkat tehát egyszerűbbé tehetjük a feltevéssel, miszerint az eredeti rendszerben  $|\mathbf{k}|$ ,  $|\mathbf{s}|$ ,  $M_z$  nem-elfajultak és így mint átlós mátrixok adottak kvantummechanikailag.

Ekkor az eredeti rendszer már csupán egyetlen koordináta tekintetében elfajult (vö. a modell teljes mértékben analóg klasszikus mechanikai tárgyalásával).<sup>5</sup> Ezt a koordinátát az elektron  $\mathbf{s}$  sajátmomentumának  $s_z = \frac{h}{2\pi} m_s$  komponensével és a konjugált szögváltozóval jellemezhetjük. Jellemezhető azonban a  $\mathbf{M}$  össz-impulzusmomentummal is, és a hozzá kanonikusan konjugált változóval.

A kvantummechanika perturbációs eljárása elfajult rendszerekre a következőképpen vázolható:<sup>6</sup>

Legyen adott a perturbálatlan probléma valamely  $p^0, q^0$  megoldása, továbbá a perturbációs függvény a perturbálatlan probléma koordinátáinak kifejezéseként. Ha a kiindulásképpen választott rendszer nem volna elfajult, úgy a perturbációnak megfelelő  $W$  járulékos energiáit a perturbációs függvénynek a perturbálatlan mozgásra képezett  $H$  időbeli középértéke adná meg. Ez a  $H$  középérték aztán már automatikusan átlós mátrix. Ha azonban az eredeti rendszer elfajult, azaz mondjuk az  $n+1, \dots, n+r$  állapotok energiaértékei egybeesnek, úgy a perturbációs energia

<sup>5</sup> Lásd pl. *W. Pauli*, *ZS. f. Phys.* **16**, 155, 1923; **20**, 371, 1924.

<sup>6</sup> *M. Born, W. Heisenberg és P. Jordan*, *ZS. f. Phys.* **35**, 557, 1926. Lásd különösen a 3. fejezet 2. szakaszát.



$H$  közéértéke még tartalmaz olyan elemeket, amelyek az  $n+1, \dots, n+r$  állapotokat összekötő átmeneteknek felelnek meg, azaz  $H$  nem átlós mátrix.

Ebben az esetben  $p^0$ -ra és  $q^0$ -ra egy

$$\left. \begin{aligned} p' &= S^{-1} p^0 S, \\ q' &= S^{-1} q^0 S \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

kanonikus transzformációt kell alkalmazni, úgy hogy

$$W = S^{-1} H S \quad (6)$$

átlós mátrix legyen. Az  $S$  transzformációs mátrix, mint  $H$  is, csak az  $n+1, n+2, \dots, \dots, n+r$  kvantumszámsorozat állapotait összekötő elemeket tartalmaz, és átlós elemeket. Az  $S$  transzformációs függvényt oly módon határozhatjuk meg, hogy megoldjuk az  $r$  számú,  $r$  ismeretlenes

$$W S_k - \sum_l H_{kl} S_l = 0 \quad (k, l = n+1, \dots, n+r) \quad (7)$$

egyenletet. Megoldás  $W$ -nek  $r$  számú különböző értéke mellett létezik; ezek a probléma „sajátértékei” s egyben a perturbált rendszerben fellépő járulékos energiák. Jelölje  $*$  az áttérést a konjugált-komplex mennyiségre,  $\sim$  pedig az indexek felcserélését. Ekkor valamely két sajátértékre,  $W_n$ -re és  $W_m$ -re fennáll:

$$\left. \begin{aligned} W_n S_{kn} - \sum_l H_{kl} S_{ln} &= 0, \\ W_m S_{km}^* - \sum_l H_{kl}^* S_{lm}^* &= 0; \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

tehát

$$(W_n - W_m) \sum_{k=n+1}^{n+r} S_{kn} S_{km}^* = 0.$$

Normáljuk a

$$\sum_{k=n+1}^{n+r} S_{kn} S_{kn}^* = 1 \quad (9)$$

képlet szerint; ekkor fennáll  $S \cdot \tilde{S}^* = 1$ , és  $S$  a keresett transzformációs mátrix. Ezt behelyettesítve (5)-be, kapjuk az adott közelítésben a perturbált rendszer koordinátáit.

**3. A számítás elvégzése.** Ezt az eljárást a tárgyalni kívánt problémára alkalmazva a következő általános számítási módszert nyerjük:

1. A perturbációs energia  $H_3$  részét — miután az az elfajult koordinátákat nem tartalmazza — először elhagyhatjuk és utólag mint additív konstans hozzáadhatjuk az energiához.



2. A  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{s}$  impulzusmomentumokra a kvantummechanika általános szabályai szerint (i.m.) a következő összefüggések érvényesek:<sup>7</sup>

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{k}^2 &= \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 k(k+1), & \mathbf{s}^2 &= \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 s(s+1), \\ k_x k_y - k_y k_x &= -\varepsilon k_z & \left(\varepsilon = \frac{h}{2\pi i}\right), \\ \text{vagy egyszerűbben} & & \mathbf{k} \times \mathbf{k} = -\varepsilon \mathbf{k}, & \mathbf{s} \times \mathbf{s} = -\varepsilon \mathbf{s} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

(a  $\times$  vektorszorzatot jelöl);  $\mathbf{k}$  minden komponense felcserélhető  $\mathbf{s}$  minden komponensével.

Legyen

$$k_z = m_k \frac{h}{2\pi}, \quad s_z = m_s \frac{h}{2\pi},$$

akkor

$$\left. \begin{aligned} (k_x + ik_y)(k, m_k - 1; k, m_k) &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{k(k+1) - m_k(m_k - 1)}, \\ (k_x - ik_y)(k, m_k; k, m_k - 1) &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{k(k+1) - m_k(m_k - 1)}, \\ (s_x + is_y)(s, m_s - 1; s, m_s) &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s - 1)}, \\ (s_x - is_y)(s, m_s; s, m_s - 1) &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s - 1)}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Vezessük be most  $m_k$  helyett a  $m = m_k + m_s$  egyenlettel definiált  $m$  változót; ekkor  $m_s$  kanonikus konjugáltja az eddig  $m_k$ -hoz és  $m_s$ -hez kanonikusan konjugált „csomóhosszak” különbsége (vö. a fent idézett klasszikus mechanikai számítással). Fennáll tehát

$$H_1 + H_2 = \frac{e}{2mc} \mathbf{H}(\mathbf{k} + 2\mathbf{s}) + \frac{e^2 Z}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}. \quad (12)$$

Az

$$\frac{e}{2mc} |\mathbf{H}| \frac{h}{2\pi} = \mu$$

és

$$\frac{1}{2} \frac{e^2 Z}{m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 = \lambda$$

<sup>7</sup> Minthogy a fent idézett munkában az impulzusmomentumok definíciója ellentett előjellel történt, ott

$$M_x M_y - M_y M_x = \varepsilon M_z$$

volt érvényes.



rövid jelölésekkel írható:

$$H_1 + H_2 = \mu(k_z + 2s_z) + \lambda(k_z s_z + \frac{1}{2}(k_x + ik_y)(s_x - is_y) + \frac{1}{2}(k_x - ik_y)(s_x + is_y))$$

és

$$\left. \begin{aligned} (H_1 + H_2)(m_s, m_s) &= \mu(m + m_s) + \lambda m_s(m - m_s), \\ (H_1 + H_2)(m_s, m_s - 1) &= \frac{1}{2} \lambda \sqrt{[s(s+1) - m_s(m_s - 1)][k(k+1) - (m - m_s)(m - m_s + 1)]}, \\ (H_1 + H_2)(m_s - 1, m_s) &= \frac{1}{2} \lambda \sqrt{[s(s+1) - m_s(m_s - 1)][k(k+1) - (m - m_s)(m - m_s + 1)]}. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Az  $m, k, s$  indexeket, melyek értéke konstans, ezen egyenletek bal oldalán elhagytuk

3. Az adott  $k, s, m$  értékrendszerhez tartozó  $m_s$  értékek számát a

$$\left. \begin{aligned} -s &\leq m_s \leq +s \\ -k &\leq m - m_s \leq +k \\ k + m &\geq m_s \geq -k + m \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

és  
vagy

feltételek határozzák meg.

Az  $S$  transzformációs függvényt (7) szerint a

$$WS_r - \Sigma H_{rl} S_l = 0 \quad (15)$$

lineáris egyenletek megoldásával kapjuk, ahol az  $rl$  indexek  $m_s$ -nek mindazokat az értékeit befutják, amelyek az adott  $k, s, m$  értékrendszer mellett lehetségesek. A  $W$  sajátértékeket úgy kapjuk, hogy a determinánsot, amelynek elemei  $\delta_{rl}W - H_{rl}$ , zérussal tesszük egyenlővé. Jelölje  $m_s$ -nek adott  $k, s, m$  mellett lehetséges legkisebb értékét  $m_1$ , legnagyobb értékét  $m_2$ ; így módon kapjuk a (16) képletet.

Egy  $(m_2 - m_1 + 1)$ -edfokú algebrai egyenletünk van  $W$ -re, a  $k, s, m$  kvantum-számokban racionális koefficienssekkel. A gyökök összege egyenlő a második tag negatív együttthatójával, azt tehát

$$\sum_{n=m_1}^{m_2} W_n = \sum_{m=m_1}^{m_2} \mu(m + m_1) + \lambda m_1(m - m_1) \quad (17)$$

adja meg. Az a körülmény, hogy a  $\sum_{n=m_1}^{m_2} W_n$  összeg lineáris  $\lambda$ -ban és  $\mu$ -ben, képezi a Zeeman-effektus „összegezési elvé”-nek tartalmát.

4. Ahhoz, hogy a kvantummechanikai számítás eredményeit minden részletükben nyomon követhessük, célszerű lesz egy speciális példát megvizsgálni. Ebből a célból a dublett-modellt választjuk ( $s = \frac{1}{2}$ ).



$$\begin{vmatrix}
W - \mu(m + m_1) - \lambda m_1(m - m_1) & -\frac{1}{2} \lambda \sqrt{[s(s+1) - m_1(m_1+1)][k(k+1) - (m - m_1)(m - m_1 - 1)]} & 0 & 0 \dots 0 \\
-\frac{1}{2} \lambda \sqrt{[s(s+1) - m_1(m_1+1)][k(k+1) - (m - m_1)(m - m_1 - 1)]} & W - \mu(m + m_1 + 1) - \lambda(m_1 + 1)(m - m_1 - 1) & -\frac{1}{2} \lambda \sqrt{\phantom{x}} & 0 \dots 0 \\
0 & -\frac{1}{2} \lambda \sqrt{[s(s+1) - (m_1 + 1)(m_1 + 2)][k(k+1) - (m - m_1 - 1)(m - m_1 - 2)]} & W - \mu \dots & -\frac{1}{2} \lambda \sqrt{\phantom{x}} \dots 0 \\
\dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots
\end{vmatrix} = 0 \quad (16)$$







Az  $m_s$  kvantumszám lehetséges értékei itt általánosságban  $\pm \frac{1}{2}$ , ha azonban  $m = k + \frac{1}{2}$ , úgy  $m_s$  csupán a  $+\frac{1}{2}$ , ha viszont  $m = k - \frac{1}{2}$ , úgy csak a  $-\frac{1}{2}$  értéket veheti fel. A (16) képlet helyére tehát általában a

$$\begin{vmatrix} W - \mu \left( m - \frac{1}{2} \right) + \lambda \left( m + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \lambda \sqrt{k(k+1) - \left( m + \frac{1}{2} \right) \left( m - \frac{1}{2} \right)} \\ -\frac{1}{2} \lambda \sqrt{k(k+1) - \left( m + \frac{1}{2} \right) \left( m - \frac{1}{2} \right)} & W - \mu \left( m + \frac{1}{2} \right) - \lambda \frac{1}{2} \left( m - \frac{1}{2} \right) \end{vmatrix} = 0 \quad (18)$$

vagy

$$W^2 - \left( 2\mu m - \frac{\lambda}{2} \right) W + \mu^2 \left( m^2 - \frac{1}{4} \right) - \mu \lambda \cdot m - \frac{\lambda^2}{4} k(k+1) = 0 \quad (19)$$

egyenlet lép:

$$W = \mu m - \frac{\lambda}{4} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\mu^2 + 2\mu\lambda \cdot m + \lambda^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2}. \quad (20)$$

Ha viszont  $m = k + \frac{1}{2}$ , úgy  $m_s = \frac{1}{2}$  és

$$W = \mu \left( m + \frac{1}{2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left( m - \frac{1}{2} \right), \quad (21)$$

ha pedig  $m = -k - \frac{1}{2}$ , úgy  $m_s = -\frac{1}{2}$  és

$$W = \mu \left( m - \frac{1}{2} \right) - \frac{\lambda}{2} \left( m + \frac{1}{2} \right) \quad (22)$$

következik. Vezessük be a

$$v = \frac{\lambda}{\mu} \left( k + \frac{1}{2} \right)$$

jelölést; ekkor

$$\left. \begin{aligned} W &= \mu \left[ m - \frac{v}{k + \frac{1}{2}} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + 2 \frac{m}{k + \frac{1}{2}} v + v^2} \right] \\ \text{ill.} \\ W_{m=k+\frac{1}{2}} &= \mu \left[ m \left( 1 + \frac{v}{2k+1} \right) - \frac{v}{k + \frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \right] = \mu \left[ k+1+v \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{k + \frac{1}{2}} \right) \right], \\ W_{m=-k-\frac{1}{2}} &= \mu \left[ m \left( 1 - \frac{v}{2k + \frac{1}{2}} \right) - \frac{v}{k + \frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \right] = \mu \left[ -k-1+v \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{k + \frac{1}{2}} \right) \right]. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$



A (23) egyenletek megegyeznek a Voigt-féle csatolási elméletből ismert dublett-formulákkal.<sup>8</sup>

5. Áttérünk az intenzitások kiszámítására. A transzformációs függvény meghatározása céljából megoldjuk a

$$\left. \begin{aligned} WS_{-\frac{1}{2}} - (H_1 + H_2) \left( -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) S_{-\frac{1}{2}} \\ - (H_1 + H_2) \left( -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right) S_{+\frac{1}{2}} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

egyenletet.

Kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} S_{+\frac{1}{2}} &= C \left( W - \mu \left( m - \frac{1}{2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left( m + \frac{1}{2} \right) \right), \\ S_{-\frac{1}{2}} &= C \frac{\lambda}{2} \sqrt{k(k+1) - \left( m^2 - \frac{1}{4} \right)}, \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

ahol  $C$  egyelőre tetszőleges konstans. Ha ismét megkülönböztetjük  $W$  két értékét:

$$„W_{+\frac{1}{2}}” \quad \text{és} \quad „W_{-\frac{1}{2}}”,$$

az alábbi képletek következnek:

$$\left. \begin{aligned} S_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} &= C_{+\frac{1}{2}} \left( W_{+\frac{1}{2}} - \mu \left( m - \frac{1}{2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left( m + \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{2} C_{+\frac{1}{2}} \left( \mu + \lambda m + \sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu m + \lambda^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2} \right), \\ S_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} &= C_{+\frac{1}{2}} \frac{\lambda}{2} \sqrt{k(k+1) - \left( m^2 - \frac{1}{4} \right)}, \\ S_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} C_{-\frac{1}{2}} \left( \mu + \lambda m - \sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu m + \lambda^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2} \right), \\ S_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= C_{-\frac{1}{2}} \frac{\lambda}{2} \sqrt{k(k+1) - \left( m^2 - \frac{1}{4} \right)}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

A (9) normálási feltételből következik végül:

$$\left. \begin{aligned} |C_{+\frac{1}{2}}| &= \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2} \left( \mu + \lambda m + \sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu m + \lambda^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2} \right) \cdot \sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu m + \lambda^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2}}}, \\ |C_{-\frac{1}{2}}| &= \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2} \left( -\mu - \lambda m + \sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu m + \lambda^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2} \right) \cdot \sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu m + \lambda^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2}}}. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

\* Vö. pl. A. Sommerfeld, ZS. f. Phys. 8, 257, 1922.



Az  $m = \pm(k + \frac{1}{2})$  esetben — mivel itt nincs elfajulás — természetesen kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} S_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} &= 1, & S_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= 0, \\ S_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= 1, & S_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Az intenzitások kiszámítása végül a (26), (27), (28) eredményeknek az (5) transzformációba való behelyettesítésével történik;  $p^0$  és  $q^0$  helyére a perturbálatlan rendszer megoldásai helyettesítendőek. Itt tekintetbe kell vennünk, hogy az elektron  $q^0$  koordinátái  $m_s$ -re vonatkozóan átlós mátrixok.

Elegendő továbbá a  $k \rightarrow k-1$  átmeneteket szemügyre venni, mivel a  $k \rightarrow k+1$  átmenetek semmi újat nem adnak.

A következő képleteket Born, Heisenberg és Jordan munkájából vesszük [i.m. Kap. 4, (33) egyenlet]:

$$\left. \begin{aligned} q_z^0(k, m, m_s; k-1, m, m_s) &= A(k) \sqrt{k^2 - (m - m_s)^2}, \\ (q_x^0 + i q_y^0)(k, m-1, m_s; k-1, m, m_s) \\ &= A(k) \sqrt{(k - m + m_s)(k - m + m_s + 1)}, \\ (q_x^0 - i q_y^0)(k, m, m_s; k-1, m-1, m_s) \\ &= A(k) \sqrt{(k + m - m_s)(k + m - m_s - 1)}; \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

$A(k)$  egy csak  $k$ -tól függő mennyiséget jelöl.

A (26—29) képleteket (5)-be helyettesítve elemi számítással nyerjük a keresett intenzitásokat. Az általános képletek azonban elég bonyolultak. A következőkben az eredményt a  $D$ -vonaltípus speciális esetére adjuk meg, azaz  $k = 1 \rightarrow k = 0$  átmeneteket veszünk szemügyre. Az (5) transzformáció segítségével kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} |q_z'|^2 \left( 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) &= \frac{1}{2} |A^2(1)| \left[ 1 + \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right], \\ |q_z'|^2 \left( 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) &= \frac{1}{2} |A^2(1)| \left[ 1 - \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right], \\ |q_z'|^2 \left( 1, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) &= \frac{1}{2} |A^2(1)| \left[ 1 + \frac{-\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right], \\ |q_z'|^2 \left( 1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) &= \frac{1}{2} |A^2(1)| \left[ 1 - \frac{-\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right]. \end{aligned} \right\} \quad (30)$$



$$\left. \begin{aligned}
 |q'_x + iq'_y|^2 \left( 1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) &= |A^2(1)| \left( 1 + \frac{\mu - \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right), \\
 |q'_x + iq'_y|^2 \left( 1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) &= |A^2(1)| \left( 1 - \frac{\mu - \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right), \\
 |q'_x + iq'_y|^2 \left( 1, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) &= |A^2(1)| 2, \\
 |q'_x - iq'_y|^2 \left( 1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) &= |A^2(1)| 2, \\
 |q'_x - iq'_y|^2 \left( 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) &= |A^2(1)| \left( 1 - \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right), \\
 |q'_x - iq'_y|^2 \left( 1, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) &= |A^2(1)| \left( 1 + \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}} \right).
 \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

Ezek az intenzitás-képletek is megegyeznek a Voigt-féle elméletből levezetett formulákkal (vö. A. Sommerfeld, i.m. 266. old.).

4. A  $\lambda \ll \mu$  és  $\mu \ll \lambda$  határesetek speciális tárgyalása. A tapasztalati eredmények és az elmélet összehasonlításának megkönnyítése céljából célszerű az elméleti eredményeket a  $\lambda \ll \mu$ ,  $\lambda \gg \mu$  határesetekre külön levezetni. A  $\lambda \ll \mu$  határeset az előző szakasz eredményeiből minden további nélkül megkapható. Első közelítésben (a  $\lambda^2$  nagyságrendű tagokig menve) a (16) determináns pl. az átlós elemek szorzatára redukálódik, és kapjuk:

$$W = (H_1 + H_2)(m_s, m_s).$$

A  $\mu \ll \lambda$  határeset számításához azonban új megfontolásokra van szükség. Legyen először  $\mu = 0$ ; ekkor  $H_1 = 0$ , és egy tag marad, a  $\mathbf{k}$ -sel arányos  $H_2 = 0$ . Célszerű bevezetni az atom

$$\mathbf{M} = \mathbf{k} + \mathbf{s}$$

össz-impulzuszmomentumát. Ekkor  $\mathbf{k}$  és  $\mathbf{s}$  felcserélhetősége folytán fennáll:

$$\mathbf{M}^2 = \mathbf{k}^2 + \mathbf{s}^2 + 2\mathbf{k}\mathbf{s}. \quad (31)$$

Minthogy másrésről

$$\mathbf{M}^2 = \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 j(j+1)$$



írhatjuk:

$$\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 \mathbf{k}s = \frac{1}{2} (j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)) \quad (32)$$

és

$$H_2 = \frac{1}{2} \lambda (j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)).$$

A  $j$  kvantumszám függvényeként  $H$  átlós mátrix.

A  $\mu$  paraméter kicsiny értékeire most a (32)-vel jellemzett rendszert tekinthetjük „perturbálatlan” rendszernek. A perturbálatlan rendszerben az atom most tehát az össz-impulzusmomentum mint tengely körül precessziót végez. A perturbált rendszer energiaértékeit  $H_1$ -nek a perturbálatlan mozgásra képezett időbeli közép-értékei szolgáltatják. Bontsuk fel gondolatban  $\mathbf{k}$ -t és  $\mathbf{s}$ -et  $\mathbf{M}$ -mel párhuzamos és rá merőleges komponensekre, úgy az utóbbi a mondott precesszió folytán a közép-érték képzésekor zérust szolgáltat, és csak az előbbi szolgáltat hozzájárulást  $H_1$ -hez.

Ez a klasszikus mechanikától kölcsönzött szemlélet átvihető a kvantum-mechanikába, miután valamennyi tekintetbe jövő mennyiség felcserélhető.

A mondott  $\mathbf{M}$  irányú komponensek:

$$(\mathbf{k} \text{ komponense}) = \frac{(\mathbf{Mk})}{M^2} M$$

és

$$(\mathbf{s} \text{ komponense}) = \frac{(\mathbf{Ms})}{M^2} M,$$

így tehát

$$\left. \begin{aligned} \bar{H}_1 &= \frac{e}{2mc} \mathbf{HM} \left( \frac{(\mathbf{Mk})}{M^2} + 2 \frac{(\mathbf{Ms})}{M^2} \right) \\ &= \frac{e}{2mc} \mathbf{HM} \left( 1 + \frac{(\mathbf{Ms})}{M^2} \right) \\ &= \mu \cdot m \left( 1 + \frac{j(j+1) - k(k+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right), \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

végül általában  $\mu \ll \lambda$  mellett:

$$\left. \begin{aligned} \overline{H_1 + H_2} &= \mu \cdot m \left( 1 + \frac{j(j+1) - k(k+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \lambda (j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)). \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

A (34) egyenlet megegyezik a Landé-formulákkal ( $g$ - és  $\gamma$ -értékek, „intervallumarányok”).

5. A finomszerkezet kiszámítása térmentes esetben. Az eddigi számítások általánosságban igazolták, hogy az Uhlenbeck—Goudsmit-féle hipotézis a Zeeman-effektust és az intervallumarányokat a tapasztalattal összhangban értelmezi.



Annak a kérdésnek az eldöntésére, hogy az alapul vett hipotézis helyesen ad-e számot az intervallumok abszolút értékeiről is, még ki kell számítanunk  $\lambda$  és  $H_3$  értékét.

Feladatunk tehát az

$$\frac{1}{r}, \quad \frac{1}{r^2}, \quad \frac{1}{r^3}$$

középértékek kiszámítása. Ezt a számítást a kétdimenziós hidrogénatom<sup>9</sup> alapulvételével végezzük el; a perturbálatlan atom energiájára fennáll:

$$H_0 = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) - \frac{e^2 Z}{r},$$

$$\left. \begin{aligned} p_x x - x p_x &= \frac{h}{2\pi i}, & p_y y - y p_y &= \frac{h}{2\pi i}; \\ xy - yx &= 0; & p_x p_y - p_y p_x &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Vezessünk be polárkoordinátákat az

$$\left. \begin{aligned} r^2 &= x^2 + y^2; & p_r &= m\dot{r}; & \varphi &= \arctg \frac{y}{x}; \\ p_\varphi &= m(x\dot{y} - y\dot{x}) = mr^2\dot{\varphi} \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

képleteknek megfelelően. Kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m} \left[ p_r^2 + \frac{1}{r^2} \left( p_\varphi^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 \right) \right] - \frac{e^2 Z}{r}; \\ p_r r - r p_r &= \frac{h}{2\pi i}; & p_\varphi \varphi - \varphi p_\varphi &= \frac{h}{2\pi i}; \\ r\varphi - \varphi r &= 0; & p_r p_\varphi - p_\varphi p_r &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (36a)$$

A többször idézett Kvantummechanika II c. cikk szerint [600. old., (17) egyenlet] a  $p_\varphi$  mennyiség kvantált:

$$p_\varphi = m_0 \frac{h}{2\pi},$$

ahol azért, hogy Pauli eredményeivel (i.m.) összhangba kerüljünk, fel kell tennünk, hogy  $m_0$  feles;  $m_0 - \frac{1}{2}$  azonosítandó a fent bevezetett  $k$ -val. A háromdimenziós probléma Hamilton-függvénye Pauli szerint a következő alakú:

$$H_0 = \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{1}{r} \mathbf{k}^2 \right) - \frac{e^2 Z}{r}. \quad (37)$$

Ha azt akarjuk, hogy (36a) és (37) megegyezzek, úgy következik:

$$k^2 = \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 k(k+1) = p_\varphi^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 = \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 \left( m_0^2 - \frac{1}{4} \right)$$

<sup>9</sup> A középértékek egzakt kiszámítását a háromdimenziós esetre W. Pauli elvégezte. Az eredmény megegyezik a fenti számításokéval.



Az  $\frac{\bar{1}}{r}$  középérték a

$$-\frac{\overline{Ze^2}}{r} = \overline{E_{\text{pot}}} = -2\overline{E_{\text{kin}}} = 2W_0 \quad (38)$$

egyenletből adódik. Itt

$$W_0 = H_0 = -\frac{RhZ^2}{n^2},$$

ahol  $n$  egész szám. Pauli nyomán a

$$\frac{d}{dt} p_r = -\frac{\partial H_0}{\partial r} = -\frac{1}{mr^3} \left[ p_\phi^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 \right] + \frac{e^2 Z}{r^2} \quad (39)$$

mozgásegyenletből időbeli középérték képezésével következik:

$$\frac{\overline{e^2 Z}}{r^2} = \frac{\bar{1}}{mr^3} \left[ p_\phi^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 \right]. \quad (40)$$

Végül (36) szerint fennáll

$$\left. \begin{aligned} mr^2 \dot{\phi} &= p_\phi \\ \frac{p_\phi}{mr^2} &= \bar{\phi}. \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

Bevezetve az  $n$  főkvantumszámhoz, ill. a neki megfelelő  $J = nh$  hatásváltozóhoz konjugált szögváltozót<sup>10</sup>, a klasszikus elmélettel analógiában kapjuk:

$$\bar{\phi} = 2\pi \dot{w} = -2\pi \frac{\partial H_0}{\partial J} = \frac{4\pi RZ^2}{n^3}. \quad (42)$$

A (38.), (40), (41) és (42) egyenletekből végül is a  $p_\phi = \frac{h}{2\pi} \left( k + \frac{1}{2} \right)$  összefüggés felhasználásával kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\bar{1}}{r} &= \frac{1}{e^2} \cdot \frac{2RhZ}{n^2}; \\ \frac{\bar{1}}{r^2} &= \frac{m}{p_\phi} \bar{\phi} = \frac{m}{\frac{h}{2\pi} \left( k + \frac{1}{2} \right)} \frac{4\pi RZ^2}{n^3} = \frac{8\pi^2 m RZ^2}{h \left( k + \frac{1}{2} \right) n^3}; \\ \frac{\bar{1}}{r^3} &= \frac{\bar{1}}{r^2} \cdot \frac{e^2 Z m}{p_\phi^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2} = \frac{m^2 e^2 RZ^3 32\pi^4}{k \left( k + \frac{1}{2} \right) (k+1) n^3 h^3}. \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

<sup>10</sup> Ilyen változók bevezetésének jogosultságát Born és Wiener (ZS. f. Phys. 36, 174, 1926), valamint Dirac (i. m.) mutatta meg.



Eltűnő külső mágneses tér mellett (2—4), (34) és (43) szerint a teljes perturbációs energiát a

$$H_2 + H_3 = \left. \begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{e^2 Z}{m^2 c^2} \cdot \frac{4\pi^2 m^2 e^2 R Z^3 (j(j+1) - k(k+1) - s(s+1))}{hk \left(k + \frac{1}{2}\right) (k+1) n^3} \\ & - \frac{1}{2mc^2} \left( -\frac{3R^2 h^2 Z^4}{n^4} + \frac{8\pi^2 m e^4 R Z^4}{h \left(k + \frac{1}{2}\right) n^3} \right) \\ & = \frac{2R^2 h^2 Z^4}{n^3 mc^2} \left( \frac{j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)}{2k \left(k + \frac{1}{2}\right) (k+1)} - \frac{1}{k + \frac{1}{2}} + \frac{3}{4n} \right) \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

adja meg.

Dublettatomokra ( $s = \frac{1}{2}$ ), azaz a  $H$  atom és az alkáli-fémek spektrumára és a röntgen-spektrumokra ezek a képletek kísérletileg pontosan ellenőrizhetők: a tapasztalat szerint (ha az elektronok egymásra való hatását elhanyagoljuk) itt két, különböző  $k$ -val, de egyenlő  $j$ -vel jellemzett energiaszint egybeesik. Az egyenlő  $k$ -val, de különböző  $j$ -vel jellemzett két szint távolságát a Sommerfeld-féle finomszerkezet-képlet adja meg.

A (44) egyenletbe az  $s = \frac{1}{2}$ ,  $j = k \pm \frac{1}{2}$  értékeket kell behelyettesítenünk; kapjuk

$$\left. \begin{aligned} & k = j - \frac{1}{2} \text{ esetén:} \\ & H_2 + H_3 = \frac{2R^2 h^2 Z^4}{n^3 mc^2} \left( \frac{1}{2j \left(j + \frac{1}{2}\right)} - \frac{1}{j} + \frac{3}{4n} \right) \\ & = \frac{2R^2 h^2 Z^4}{n^3 mc^2} \left( -\frac{1}{j + \frac{1}{2}} + \frac{3}{4n} \right); \\ & k = j + \frac{1}{2} \text{ esetén:} \\ & H_2 + H_3 = \frac{2R^2 h^2 Z^4}{n^3 mc^2} \left( -\frac{1}{2 \left(j + \frac{1}{2}\right) (j+1)} - \frac{1}{j+1} + \frac{3}{4n} \right) \\ & = \frac{2R^2 h^2 Z^4}{n^3 mc^2} \left( -\frac{1}{j + \frac{1}{2}} + \frac{3}{4n} \right). \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

Általában érvényes tehát  $s = \frac{1}{2}$ -re:

$$H_2 + H_3 = \frac{2R^2 h^2 Z^4}{n^3 mc^2} \left( -\frac{1}{j + \frac{1}{2}} + \frac{3}{4n} \right) \quad (46)$$



A (46) képlet a tapasztalati tényekről teljes mértékben számot ad. Speciálisan abból, hogy  $k$  a (46) egyenletben nem lép fel, következik, hogy az Uhlenbeck—Goudsmit-féle elmélet értelmezi az „árnyékolási dubletteket”. A mágneses dublett-felhasadások a Sommerfeld-féle finomszerkezet-képlet szolgáltatja értékekkel megegyeznek.

Noha a kérdés: mennyiben mentesek az itt ismertetett elmélet (2—4) alapfeltevései az önkénnytől, még nem dönthető el, számításaink eredményei mindazonáltal egyrészt a Compton—Uhlenbeck—Goudsmit-hipotézis, másrészt a kvantummechanika fontos támaszának tekinthetők.







# KÖNYVISMERTETÉS

*Attix—Roesch: RADIATION DOSIMETRY*, 2. ed. vol. II. Instrumentation,  
Academic Press, New York, 1966.

A dozimetriával foglalkozók körében jól ismert Hine—Brownell azonos című könyvének második kiadása a fenti munka, mely az utóbbi évek nagymértékű fejlődését tükrözi a dozimetriában.

A háromkötetes mű második kötete jelent meg először. Ez, mint címe is utal rá, a dozimetriában használt műszerek leírásával és alkalmazásával foglalkozik. Egyes fejezetei tárgyalják az ionizációs kamrák, a GM- és proporcionális-számlálók, a szcintillációs detektorok, a kémiai-, szilárdtest-, filmemulziós-doziméterek, valamint a kaloriméterek alapelvét, különböző típusait, hitelesítésüket, a különféle sugárfajták iránti érzékenységet stb. Részletes leírást találhatunk az egyes mérések összeállítására, az áramköri kapcsolásokra, a megfelelő típusú kijelzőműszerek kiválasztására.

A szakterület tíz neves képviselője által írt kézikönyv — a valószínűleg a közeljövőben megjelenő további két kötetével együtt — a sugárdozimetria tudományának újabb jó forrása lesz, melyet minden e területen dolgozó kutató (fizikus, vegyész, mérnök, orvos) egyaránt haszonnal tanulmányozhat.

*B. M.-né*

*Kiefer—Maushart: STRAHLENSCHUTZMESSTECHNIK*,  
Verl. G. Braun, Karlsruhe, 1964.

A szerzők célul tűzik ki, hogy egyrészt a jelenlegi ismeretek és a rendelkezésre álló irodalom alapján összehasonlítsák a sugárvédelmi mérés technikai módszereket, másrészt, hogy a sugárvédelmi szakembereknek és mindazoknak, akik sugárvédelmet valamilyen formában terveznek, kiviteleznek, illetőleg felülbírálnak segítségére legyenek.

Az alapvető sugárvédelmi mérések — dózis és aktivitás mérések — ismertetése után fokozatosan vezetik be a bonyolultabb mérés technikai követelményeket, mint pl. radionuklidok azonosítása, dózismérés kevert sugárzási térben, inkorporációmérés stb. A magsugárzással hivatásszerűen foglalkozók sugárvédelme mellett külön fejezetet szentelnek a lakosság védelmére, nemcsak békés, hanem háborús körülmények között is. Az utolsó fejezet a legújabb fejlődési tendenciákkal foglalkozik, ezen belül az újabb eszközökkel, pl. félvezető detektorok, valamint az újabb alkalmazásokkal, így a nagyenergiájú sugárzások mérés technikájával, és az űrsugárzás mérésével.

A rendkívül hasznos kézikönyv 600 oldalon keresztül — többszáz ábrával és táblázattal ellátva — minden bizonnyal bőséges és kimerítő ismereteket ad az olvasónak a tárgyköréről.

*B. M.-né*

## SZS JELENTÉSEK

A Német Demokratikus Köztársaság Központi Sugárvédelmi Intézete (Staatliche Zentrale für Strahlenschutz) 1964-ben kezdte meg jelentéseinek kiadását.

A reportok általában munkabeszámoló, vagy cikk jellegűek, de nagy számmal jelennek meg összefoglaló monográfiák és irodalmi áttekintések is.

Tekintve, hogy az Intézet az NDK-ban felmerülő összes sugárvédelmi problémával hivatalból foglalkozik, a jelentések tematikája meglehetősen széles skálát mutat. A sugárvédelmi intézet helyén korábban por és aeroszol kutató intézet működött, a jelenlegi szakemberek egy részével, ezért az aeroszolos fizikai, biológiai és technikai kérdéseiről igen értékes munkákat találhatunk az SZS



jelentések között. Több közlemény jelent meg a személyi dozimetria kérdéséről a környezet ellenőrzés módszereiről és ezek mérési eredményeiről. Az emberi szervezetbe került radioaktivitás közvetlen és közvetett meghatározásával kapcsolatban alkalmazott eljárásairól is olvashatunk néhány jelentést. Az élelmiszerek, fall-out és földminták, valamint vizelet minták különböző izotópoktól származó aktivitásának meghatározásához, kémiai analitikai eljárásokat dolgoztak ki és ezekről a munkákról is itt számoltak be.

Értékes munkák jelentek meg mind a radioaktív hulladékok kezelésével, mind a sugárvédelemnek egyes speciális orvosi alkalmazásával, és a népesség sugárterhelésével kapcsolatban.

Évenként kb. 16 jelentés jelenik meg, minden évben 1-től kezdődő számozással (pl. SZS 12/67.) A jelentések nyelve kizárólag német, de a közlemények elején angol és orosz nyelvű rövid összefoglaló is található, kiadja a sugárvédelmi intézet igazgatója.

Cím: Staatliche Zentrale für Strahlenschutz der Deutsche Demokratischen Republik, DDR-1162 Berlin Fridrichshagen Müggelseedamm 336.

A. A.

### CLOR JELENTÉSEK

Lengyelország Központi Sugárvédelmi Laboratóriuma (Centralne Laboratorium Ochrony Radiologicznej), mely Varsóban működik, és az egész ország sugárvédelmi problémáival foglalkozik, 1961-ben adta ki első jelentését. Az intézet feladata a rutin ellenőrzés országos szinten és ezekhez a feladatokhoz kapcsolódó sugárvédelmi fejlesztő és kutató munka. A jelentések anyaga jórészt az utóbbi tevékenységből adódik, de szép számmal találhatunk a rutin ellenőrzések eredményeinek elemzésével kapcsolatos dolgozatokat is. Az intézet 10 éves fennállása alatt igen jelentős eredményeket ért el elsősorban a személyi dozimetria, a radioekológia, az exkréciós analízis, a környezeti természetes radioaktivitás vizsgálata és a félvezetődetektorok fejlesztése területén. Ezek az eredmények jól tükröződnek a CLOR jelentések anyagában is, melyek egy-egy munka elvégzése után igen kis időközönsséggel jelennek meg.

A jelentések számozása a megjelenési évtől függetlenül, kronológikus sorrendben történik (pl. CLOR-55). Évenként átlagosan 10 jelentés jelenik meg angol, vagy lengyel nyelven, de minden dolgozat elején a lengyelen kívül angol és orosz nyelvű összefoglalót is közölnek.

A CLOR jelentések beszerezhetők a következő címen: Nuclear Energy Information Center of the Polish Government Commissioner for Use of Nuclear Energy, Palace of Culture and Science, Warsaw, Poland.

A. A.







Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója  
Műszaki szerkesztő: Merkly László  
A kézirat beérkezett: 1969. IX. 9. — Példányszám: 550 — Terjedelem: 8,4 (A/5) ív  
69-7436 — Szegedi Nyomda



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
**KÖZLEMÉNYEI**

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181 útján eszközölhetők.)



Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26,491

## TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Kovács István</i> : Diszlokációk kontinuum elmélete IV. ....	1
<i>Berényi Dénes</i> : Vizsgálatok radioaktív bomlásfolyamatok törvényszerűségeinek tisztázására ..	23

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Heisenberg és P. Jordan</i> : A kvantummechanika alkalmazása az anomális Zeeman-effektus problémájára .....	77
---	----

## KÖNYVISMERTETÉS

Attix—Roesch: Radiation Dosimetry. (B. M.-né) .....	93
Kiefer—Maushart: Strahlenschutzmesstechnik. (B. M.-né) .....	93
SZS jelentések. (A. A.) .....	93
CLOR jelentések. (A. A.) .....	94



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

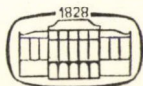
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XVIII. KÖTET

2. FÜZET



AKADEMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1970



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK

### FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy további bbitásáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó Budapest, V., Alkotmány utca 21., pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43 790 057 181 útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# MEGJEGYZÉS EGY MIKROFIZIKAI MODELL BIOLÓGIAI ALKALMAZÁSÁHOZ\*

(Bauer "Elméleti Biológiája" néhány biológiai elmélet tükrében)

ABONYI IVÁN és ELEK GÁBOR

MTA Elméleti Fizikai Tanszéki Kutatócsoport, ELTE Budapest

Goodwin az élő anyag makromolekulái (DNS, mRNS, fehérje) szintézisének leírására differenciálegyenletet állít fel. A szintézis időbeli lefolyásának diszkussziójában alkalmazhatók a statisztikus mechanika módszerei. Kimutatható, hogy a makromolekulák száma oszcillál, az oszcilláció átlagértéke nagyobb, mint egy fiktív stacionárius állapothoz tartozó érték. Ez a körülmény párhuzamba állítható a Bauer-féle „nemegyensúlyi állapot” elvével.

A múlt század második felében érdekes kísérlet történt az elméleti fizikában. Boltzmann a gázok bizonyos makroszkópos tulajdonságait úgy próbálta magyarázni, hogy a gáz mikroszkopikus szerkezetének modelljét alkotta meg. Feltételezte, hogy a gáz kicsiny, tovább nem osztható részecskékből: molekulákból, ill. atomokból áll, és ezekre érvényesek a newtoni mechanika törvényei. Ebből a feltételezésből kiindulva megmutatta, hogy a gáz makroszkópos tulajdonságai (nyomás, hőmérséklet stb.) nagy számú molekula mechanikai állapotával kifejezhetők. Ez a módszer, az ún. „statisztikus mechanika” a fizikában egyre nagyobb jelentőségű lett, amikor az anyag szerkezetének mikroszkopikus felépítését jobban megismerték.

A biológiában szintén ismerünk egy sor makroszkopikus törvényszerűséget. Ilyenek pl. a Mendel-féle szabályok, melyek az öröklődés törvényszerűségeit írják le, vagy a Rubner-tétel, mely a tápanyagok felhasználható értékét kalóriaértékükben jelöli meg. Ma már sokat tudunk a biológiai anyag mikroszkopikus (molekuláris) felépítéséről is. Korántsem lenne azonban könnyű a Boltzmannéhoz hasonló lépést megtenni a biológiában. Ennek az az oka, hogy a biológia makroszkopikus fogalmai távolról sem annyira egzaktak, mint a fenomenológiai termodinamika fogalmai. Ezenkívül a biológiában nincsen olyan elmélet, mint Newtoné volt a fizikában, amelyre a mikroszkopikus elképzelést fel lehetett építeni.

Ennek ellenére e század elején a biológiában is történt ilyen kísérlet. Megkísérelték, hogy a makroszkopikus biológiai jelenségeket (növekedés, szaporodás, mozgás, ingerlékenység stb.) az élő anyag mikroszkopikus tulajdonságaiból vezessék le. Feltételezték, hogy az élő anyagnak az a leglényegesebb tulajdonsága, hogy struktúrája nincsen egyensúlyi állapotban, és ez a nemegyensúlyi állapot tartósan megmarad, mindig újra helyreáll. Hogy ez a feltételezés mikroszkopikusan is helytálló, arra csak következtetni lehetett, mint ahogy a molekulák mechanikai tulajdonságaira vonatkozóan Boltzmann is csak közvetett bizonyítékokkal rendelkezett.

\* Érkezett 1969. márc. 19.



Miért hasznos az ilyen kísérlet? Miért volt hasznos *Bauer Ervin* kísérlete? Egy fizikus — ismerve a fizika fejlődését — erre a kérdésre talán könnyebben tud válaszolni. A gázok statisztikus mechanikája nyomán kialakult statisztikus szemlélet a mai kvantumstatisztikák alapja. Ezek tették lehetővé egy sor olyan elv megismerését, melyek érvényesek az anyag felépítésében és ma fizikai, kémiai gyakorlatunk alapját jelentik (pl. a Pauli-elv).

*Bauer* kísérlete sem maradt követők nélkül. Bár kérdésfelvetésének általánossága és mélysége ma is páratlan, ma már több biológiai elméletről tudunk, mely mikroszkopikus és makroszkopikus szemléletű egyaránt. Ilyen *Goodwiné* is [10], melyet először azért részletezünk, mert a közelmúltban számos kísérleti megfigyelést inspirált [14].

Egy gén ( $L$ ) determinálta fehérje (pl. enzim:  $Y$ ) szintéziséhez szükséges információt a sejtben a mRNS ( $X$ ) juttatja a szintézis helyére (biológiai transzkripció-transzláció). Az enzimmennyiséget az enzimszintézis ( $f$ ) és az elhasználódás intenzitásának ( $g$ ) különbsége szabja meg:

$$\frac{dY}{dt} = f(X, Y, M) - g(Y, M).$$

( $M$ : a metabolit mennyisége). *Goodwin* feltételezi, hogy  $g$  állandó,  $f$  esetében pedig csak az  $X$  változót veszi figyelembe, továbbá az összefüggést lineárisnak választja:

$$\frac{dY}{dt} = \alpha X - \beta. \quad (1)$$

Az mRNS mennyiségének változását hasonló egyenlet írja le:

$$\frac{dX}{dt} = \varphi(X, Y, M) - \psi(X, Y, M), \quad (2)$$

melyben a messenger szintézisét  $\varphi$ , elbomlását pedig  $\psi$  jelképezi. A messenger szintézis mértékét az a visszacsatolás szabályozza, melyben az enzim ( $Y$ ) működésének terméke: a metabolit ( $M$ ) hat a gén ( $L$ ) aktivitására. Az mRNS ( $X$ ) csak akkor szintetizálódhat, ha az  $L$  génlocus szabad a represszortól ( $R$ ). A represszor olyan metabolit, mely az anyagcserefolyamatokban nem használódik el, feleslegben marad. Az  $R$  tehát kifejezhető:  $[R] = \sigma[M - S]$ . Itt  $S$  az a metabolit, mely anyagcserefolyamatokban fogy el. Az  $R$  a génlocusban elfoglalja azt a matricát ( $T$ ), melyen az mRNS ( $X$ ) az aktivált nukleotidokból ( $A$ ) képződik. A  $T$  és  $R$ , illetve  $T$  és  $A$  disszociációs konstansa:

$$\frac{[TR]}{[T][R]} = K \quad \frac{[TA]}{[T][A]} = P.$$

A matricán tehát részben szabad, részben a represszortól részben az aktivált nukleotidoktól elfoglalt helyek vannak.

$$T_0 = [T] + [TA] + [TR] = \frac{[TA]}{P[A]} + [TA] + \frac{K[R][TA]}{P[A]}.$$



Goodwin feltételezi, hogy az mRNS ( $X$ ) szintézise ( $\varphi$ ) arányos a matricán kötődött aktivált nukleotidok mennyiségével, tehát  $[TA]$ -val. A  $[TA]$  az utóbbi 3 egyenletből:

$$[TA] = \frac{T_0}{1/P[A] + 1 + K[R]/P[A]} = \frac{P[A]T_0}{1 + P[A] + K[R]},$$

vagyis

$$\varphi(X, M) = \frac{kP[A]T_0}{1 + P[A] + K[R]}.$$

Ha  $1 + P[A] = B$ ,  $kP[A]T_0 = a$ , és  $\psi$  konstans, a (2) egyenlet:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{a}{B + K[R]} - b. \quad (3)$$

Feltételezi továbbá, hogy az  $M$  mennyisége lineárisan függ attól, hogy hogyan esik szét és mennyi enzim termeli:

$$\frac{dM}{dt} = rY - sM.$$

Az mRNS és az enzim keletkezésének rövid időtartamára, tehát arra az időtartamra, melyben (1) és (2) érvényesek, a metabolitmennyiséget már stacionáriusnak tekinthetjük, ezért  $rY - sM = 0$ , vagyis  $M = \frac{r}{s} Y$ .

Ezt helyettesítve (3)-ba, s figyelembe véve, hogy  $[R] = \sigma[M - S]$ :

$$\frac{dX}{dt} = \frac{a}{A + kY} - b, \quad (4)$$

ahol  $k = \frac{K\sigma r}{s}$ , és  $A = B - K\sigma S$ . Az (1) és (4) egyenletből alkotott egyenletrendszer:

$$(\alpha X - \beta) \frac{dX}{dt} + \left( b - \frac{a}{A + kY} \right) \frac{dY}{dt} = 0.$$

Integrálva az idő szerint:

$$\frac{\alpha}{2} X^2 - \beta X + bY - \frac{a}{k} \lg(A + kY) = G(X, Y). \quad (5)$$

Az  $X$  és  $Y$  értelméből következik, hogy felülről korlátosak, alsó határuk pedig 0. Mivel  $G$  monoton függvénye  $X$ -nek és  $Y$ -nak,  $G$  is korlátos és pozitív.

Jelöljük  $X$  és  $Y$  stacionárius értékét rendre  $p$ -vel és  $q$ -val, tehát (1) és (4) ez esetben:

$$\left. \begin{aligned} \frac{a}{A + kq} - b &= 0 \\ \alpha p - \beta &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Ha  $X > p$ , akkor  $\frac{dY}{dt} > 0$ . Ha ez állandóan fennáll, akkor  $G \rightarrow \infty$ , ami lehetetlen.

Ezért  $X$  nem maradhat mindig nagyobb, mint  $p$ . Ha  $Y > q$ , akkor  $\frac{dX}{dt} < 0$ , vagyis



$X$  csökken. Ha  $X$  kisebb lett, mint  $p$ , akkor  $\frac{dY}{dt} < 0$ , azaz  $Y$  is csökkenni fog a  $q$  érték alá.

Az (5) integrál  $X$  és  $Y$  változó síkján tehát zárt görbét határoz meg. Ez a görbe egy nemlineáris oszcillátor képe. Goodwin  $X$  helyett az  $x = X - p$  jelölést vezet be, ezzel az (1) egyenlet

$$\frac{dY}{dt} = cx,$$

ez a változó szerepel az (5) egyenletben is.

Eddig az elmélet lényegesen nem különbözik a sejtműködésre kidolgozott többi modelltől (pl. [15]). A sejtben azonban többféle gén, enzim, mRNS és metabolit van, összesen pl.  $v$ . Valamennyi rendszert tehát indexekkel láthatjuk el, melyek megjelölik, hogy melyikről van szó. Legegyszerűbb esetben az oszcillátorok kölcsönhatása csak a metabolitkészleten keresztül történik. (Mindegyik oszcillátorban ugyanolyan  $A$  használdik el  $X$  építéséhez.) Ha az (5)  $G$  integrálját úgy kezeljük, mint a mechanika energiaintegrálját, akkor formálisan alkalmazhatjuk a statisztikus mechanika apparátusát, tehát az eloszlásfüggvény, állapotösszeg stb. fogalmakat. A sejt állapotintegrálja:

$$Z_v = \int e^{-\frac{G}{\Theta}} dv = \prod_{i=1}^v Z_{p_i} Z_{q_i}.$$

A kinetikus energia analógiájára képzett függvény az  $X_i$ -edik változóval:

$$T_{x_i} = (x_i + p_i) \frac{\partial G}{\partial x_i} = c_i(x_i + p_i)x_i = c_i X_i(X_i - p_i).$$

E függvény statisztikus átlaga másrészt:

$$\begin{aligned} \overline{T_{x_i}} &= \overline{(x_i + p_i) \frac{\partial G}{\partial x_i}} = \int_{-p_i}^{\infty} (x_i + p_i) \frac{\partial G}{\partial x_i} e^{-\frac{G_{x_i}}{\Theta}} dx_i \Bigg/ \int_{-p_i}^{\infty} e^{-\frac{G_{x_i}}{\Theta}} dx_i = \\ &= -\Theta \int_{-p_i}^{\infty} (x_i + p_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \left( e^{-\frac{G_{x_i}}{\Theta}} \right) dx_i \Bigg/ \int_{-p_i}^{\infty} e^{-\frac{G_{x_i}}{\Theta}} dx_i = \\ &= \left\{ -\Theta \left[ (x_i + p_i) e^{-\frac{G_{x_i}}{\Theta}} \right]_{-p_i}^{\infty} + \Theta \int_{-p_i}^{\infty} e^{-\frac{G_{x_i}}{\Theta}} dx_i \right\} \Bigg/ \int_{-p_i}^{\infty} e^{-\frac{G_{x_i}}{\Theta}} dx_i = \Theta. \end{aligned}$$

Tehát

$$\overline{c_i X_i(X_i - p_i)} = \Theta. \quad (6)$$

Ugyanez levezethető a másik ( $Y$ ) változóra is.

Mármost  $\Theta$  a statisztikus mechanikában a karakterisztikus hőmérséklet, ahogy  $G$  az energia. Jelen esetben  $\Theta$  és  $G$  azonban a sejt állapotának egészére jellemző mennyiség: „talándikus” energia és hőfok — Goodwin megfogalmazása szerint. Mivel működő oszcillátor esetében  $\Theta > 0$ , az  $X - p$  (a másik változóra  $Y - q$ ) mennyiség átlagban pozitív. Az oszcillátor tehát aszimmetrikus:  $X$  és  $Y$  a stacionárius



értéktől többet tér el felfele, mint le. Ha  $\Theta$  növekszik, nagyobb az aszimmetria is. Goodwin szerint a „biológiai órák” működése az oszcillátorok ilyen periodicitásán alapszik.

A fizikának napjainkban különleges szerepe van bizonyos általános célkitűzésű biológiai elméletekben. Ezt elsősorban az magyarázza, hogy a fizika történetében találhatók a legtanulságosabb olyan példák, melyek vezérfonalul szolgálhatnak: hogyan kell anyagi jelenségek kvantitatív elméletét kidolgozni. A mikroszkopikus (molekuláris) állapothatározók nagy része kapcsolatos a fizika fogalmi rendszerével, ezért könnyebb is, ha felhasználják a fizika fogalmait. Bauer a szervezet energia-rezsimjének adataira támaszkodik, tapasztalati anyagából választja ki a fizikaiakat. Szem előtt tartja a termodinamika elveit, alkalmazza a differenciálegyenletek módszerét. Fogalmait azonban formailag és tartalmilag is önállóan kísérli meg kialakítani. Trincser arra figyelte fel (1964), hogy a nemegyensúlyi folyamatok termodinamikája — melyben érvényesek az Onsager-relációk, tehát amely az egyensúlytól nem távoleső stacionárius állapotokban használható — nem alkalmazható a legtöbb biológiai jelenségre [1]. Ez már Bauer „alapelvéből” is következik [14]. Bauer szerint a biológiai szervezet arra fordítja egész munkáját, hogy az egyensúlyi állapottól távol kerüljön. ([2] 371. old., [4] 206. old.) Trincser biológiai rendszerek jellemzésében az entrópia fizikai fogalmát kísérli meg felhasználni. Goodwin a molekuláris biológiai eredményeiből indul ki (információátadás a sejtben, biológiai transzkripció és transláció, negatív visszacsatolás: represszió stb.) és a statisztika mechanika matematikai apparátusát használja fel. Eközben integratív makroszkopikus mennyiségekhez jut. Ezeket az élő anyag állapothatározójának tekinti, és javaslatot tesz kísérleti meghatározásukra.

Fizikai — vagy fizikai mennyiségekkel kapcsolatba hozható — fogalmak egy kvantitatív elméletben könnyebben kezelhetők. Nem mindig tükrözik azonban a jelenség biológiai lényegét. Hogy pl. az immunológia gyakorlati területén maradjunk, kijelenthetjük, hogy az antigén és a hatására keletkezett antitest között erők hatnak. Ezek lehetnek elektromos erők is. Az antigénmolekula és az antitestmolekula kötődése azonban rendkívül specifikus. Ha a szervezetbe  $A$  antigént juttatunk, csak olyan  $A^+$  antitestek keletkeznek, melyek egy kémcsőben is csak  $A$ -val és nem egy másik  $B$  antigénnel kapcsolódnak. Az antigén és az antitest kapcsolódásának specificitását — és ez a jelenség biológiai lényege — erők feltételezése tehát önmagában nem magyarázza meg. Rövid hatótávolságú erőkön kívül fel kell még tételeznünk azt is, hogy  $A$  és  $A^+$  geometriai szerkezete olyan, hogy csak az egymásnak megfelelő molekulák kerülhetnek egymáshoz közel. Ha közel kerültek, már az erők hatása is érvényesül. ([13], IV. fej. 13. pont, 55. old.)  $A$  és  $A^+$  között működő erő és a kialakuló kötés energiájának szempontján túlmenően a folyamat jellemzésében nélkülözhetetlen és az előbbiekkal egyenértékű fogalom a *struktúra* fogalma. Ilyen példák mutatják, hogy fizikai és biológiai fogalmak ötvöződésének lehetősége nemcsak az elméleti, hanem az experimentális munkában is fennáll (pl. az antitestmolekulák „izoelektromos pontja”, az izomrost „saját kettőstörése” stb.). Bauerról elmondhatjuk, hogy tisztában volt a struktúra jelentőségével, hiszen egész fogalomköre a struktúrára és az általa végezhető munkára épül fel. Bauer tudta azt is, hogy a meglevő fizikai princípiumok nem elegendők biológiai jelenségek tárgyalásában [9]. Éppen mindenütt azokat az elveket keresi, melyek olyan irányban bővítik a fizika fogalomkörét, hogy biológiai folyamatok energetikai oldalának leírására is alkalmas lesz. Helyesebben: olyan fogalmakat akart kidolgozni, melyekkel ugyanolyan



egzakt és általános módon írható le biológiai jelenségek, mint ahogy a mechanikában leírható egy kő elhajítása, vagy egy rugó összenyomása.

A molekuláris jelenségek tanulmányozása óta a struktúra fogalomköre hallatlanul kiszélesedett. A struktúra fontos a mai fizikában is, pl. a szilárd testek fizikájában. A kristályok strukturális egységének, a kristályrács cellájának feltételeivel kombinált állapotfüggvények kiterjesztik a fizikai elvek alkalmazásának területét. A molekuláris folyamatok tárgyalása a szilárd testekben is a legegzaktabb törvényszerűségek alapján történhet.

Sajnos a „biológiai anyag” tárgyalása nem történhet ilyen egzaktan. Nem ismerjük még azt a strukturális egységet, „cellát”, melybe beleférnek a legfontosabb törvényszerűségeink, de amely mégis annyira egyszerű, hogy lehet egzaktul kezelni. A sejtől nagyon eltávolodtunk már. Kiindulhatunk a molekulák állapotának leírásából. A makromolekula sokféle állapotban lehet. Kezelhetjük mindegyik állapotot külön. A sokféle állapot jellemzésére használhatjuk az információelmélet fogalmait. *Trincser* pl. a biológiai struktúra entrópia-állapota mellé információfogalmat rendel [1]. Sajnos nem vagyunk abban a helyzetben, hogy molekuláris folyamatok valamennyi állapotát észlelhetsünk. Ezért a gyakorlatban használt információfogalom legtöbbször valamilyen makroszkópos jelenséghez kapcsolódik és nem jelezheti a rendszer molekuláris energiaállapotát ([3], 7/6 pont, 178. old.).

Legyen pl. az a feladatunk, hogy különbséget állapítsunk meg két 1000 aminosavból felépített fehérjemolekula között. A struktúrát meghatározza az aminosav-sorrend; ez 20 féle aminosavból:  $1000 \lg_2 20 \approx 4322$  bit információ.

Maximálisan ennyi különbség lehet a két molekula között. Különbözhet természetesen a két molekulára vonatkozó valamilyen fizikai mennyiség is, de ha a két molekula antigén, vizsgálhatjuk különbségüket az érzékeny immunológiai reakció specificitásának eszközével. Immunsavót állítunk elő az egyik molekulával szemben és vizsgáljuk, milyen reakciót ad ez a másik molekulával.

Nem lehet kétséges, hogy a szervezetbe juttatott antigén is információt jelent ([11], 207. old.). Ezt az információt használja fel a szervezet, mikor antitestet készít. De mit határoz meg ez az információ? Csupán az antigénmolekula bizonyos szakaszát. Az immunológiai specificitás ugyanis csak a molekula egy részletéhez kapcsolódik. Az összes aminosavnak csak egy töredéke szerepel az immunológiai reakcióban: azok, ahol a kapcsolat  $A$  és  $A^+$  között létrejön. Ezért ilyen adatokkal a lehetségesnél sokkal kisebb bit értéket kapunk. Bármennyire érzékeny és specifikus is ez a módszer, információelméletileg a legtökéletesebben feldolgozott adatok sem határozzák meg a két antigén molekula struktúrájának teljes különbségét.

Ilyen okok miatt a biológiai struktúrák *kibernetikai modelljében* az *információ fogalmát* ritkán kötik össze mérhető molekuláris mennyiségekkel, pl. molekulák szabad energiájával stb. E molekuláris mennyiségeket igyekeznek mindjárt mellőzni és tudomásul veszik, hogy alapegységükben, „cellájukban” a molekulák minden állapotát — és minden molekula állapotát — nem vehetik figyelembe. Ez túl részletes állapotfüggvény lenne. *Goodwin* pl. igen célszerűen csak a gén — az általa kontrollált fehérje — a fehérje működésekor keletkező metabolitok — és a gént szabályozó visszacsatolás kapcsolatának tényéből indul ki. Ez az a „cella”, melyből integratív — statisztikus szemléletű — fogalmakat épít fel.

*Bauer* mikroszkopikus biológiai kiindulópontja — melyhez absztrakció útján jut — még ennire sem lehetett részletes. Nála a „cellát” az helyettesíti, hogy az élő



anyag molekulái nincsenek egyensúlyi állapotban („Inaequilibrium-elv”). Ez tényleg annyira általános, hogy bármilyen működő biológiai struktúrára érvényes.

Szerinte ez még akkor is igaz, ha az élő anyagot, a molekulákat homogén fázisban képzeljük el. ([2], 307. old. és [4], 79. old.) Homogén élő anyagot elképzelni azonban pusztán logikai játék, homogén élő anyag molekuláris szinten nincs. *Bauer* a „homogén élő anyag” paradox gondolatához úgy jut el, hogy felismeri: fázisok feltételezése a mikrostruktúrában még nem magyarázza meg a makroszkopikus nemegyensúlyi állapot tartós fennállásának tényét. Ezért elveti a több fázis lehetőségét (ahogy *Trincser* is: [8], 183. old.), de nem vezet be új fogalmat. *Bauer* csak úgy képes felvetni a kérdést, hogy az élő anyag nemegyensúlyi állapotát vagy sok nem azonos potenciálú fázis, vagy egyetlen fázisban nemegyensúlyi állapotú molekulák okozhatják [5].

Napjainkban is változatlanul helytállónak látszik az az elv, hogy a nemegyensúlyi állapotot a biológiai rendszer belső tulajdonságai, „kényszererői” határozzák meg. ([2], 307, [4], 53. old.) Az élő anyag nincs egyensúlyi állapotban és ebben a struktúrának, valóban a mikrostruktúrának van szerepe. Helytállónak látszik *Bauer* következtetése tehát:

„Az élő rendszer általános mozgástörvénye alapján ahhoz a következtetéshez jutunk, hogy az élő anyag elméletében a következőkből kell kiindulni. Az élő anyag nemegyensúlyi állapota, következésképpen állandó munkavégző képessége — mely első feltételünk — végső soron az élő anyag molekuláris szerkezetén alapszik; az élő rendszerek által végzett munka forrása végül is e molekuláris szerkezet szabad energiája, a molekulák állapotának szabad energiája. Vagy elvünk második fogalmazása szerint: külső munka csak strukturális energia rovására történhet.” ([4], 80. old., [2], 308. old.)

A többféle fázis és a homogén anyag hamis alternatíváját ma úgy kerüljük meg, hogy tudomást veszünk a biológiai anyag mikroheterogenitásának tényéről. Ez nem azt jelenti, hogy fázisokat gondolunk el a sejtben, vagy a struktúrát kolloid anyagként kezeljük. Ez annak az elismerését jelenti, hogy olyan szervezett rendszerrel állunk szemben, melynek állapotát kisszámú, egységes fizikai határfelülettel nem rendelkező molekula is alapvetően megváltoztathatja (pl. toxin a sejtben). Fázist emlegetni ez esetben éppen olyan, mintha fázisokról beszélnének egy órával kapcsolatban, melybe homokszem került és ezért megállt. A biológiai anyag nem strukturálisan homogén, hanem olyan szempontból, hogy mindenütt vannak benne nemegyensúlyi struktúrák. Nemegyensúlyi állapotú molekulákat, molekuláris szinten mobilizálható energiát csak akkor tudunk elképzelni, ha molekuláris barrierek, gátak létezését tételezzük fel. Ezek akadályozzák meg az egyensúlyi állapot felléptét és működésüket visszacsatolás szabályozza. Ezt a feltételezést a tapasztalat igazolja. *Goodwin* mindjárt abból indul ki, hogy az élő anyagban többfajta molekula van. Ezek száma nem egyforma frekvenciával változik. Az egyik fajta molekula számossága befolyásolja a másik fajta számosságát. A mikroheterogenitásnak ilyen absztrakt feltételezése makroszkopikusan nemegyensúlyi állapothoz vezet. *Goodwin* elméletében ez úgy jelentkezik, hogy a biológiai működés egységeinek, az „oszcillátoroknak” a kölcsönhatása a makromolekulák keletkezésének periodikus változását okozza. Stacionárius állapot nincs, „átlagértékhez” csak az oszcillációt elhanyagolva juthatunk. A rendszer állapotának ilyen átlaga időben távol esik a stacionáriustól.

Két félreértést szeretnénk eloszlatni. Az egyik azzal a ténnyel kapcsolatos, hogy mai ismereteink szerint egy fehérjemolekula aminosav-sorrendje meghatározza a molekula



térbeli szerkezetét. Ez nyugvó állapotban egyensúlyi szerkezet. Ha azonban ez a molekula enzimreakciót katalizál, az enzim és a szubsztrát komplexumának szerkezete nemegyensúlyi, a rendszer sem egyensúlyi fiziológias körülmények között, amelyben ez a reakció végbemegy, tehát a struktúra sem az [6].

A másik azzal kapcsolatos, hogy az élőlényt kibernetikai rendszerként lehet modellizálni. A kibernetikai rendszer számos állapotban lehet. A környezet ingereinek hatására olyan állapotot vesz fel, melyben homeosztázisát fenntarthatja. Ilyenkor „egyensúlyi” állapotban van. *Ashby* azonban maga figyelmeztet rá, hogy „jobb, ha az olvasó a tényeket tartja szem előtt és nem a szavakat”. ([3], 5/1, 109. old.) Itt az egyensúly szónak nincsen fizikai jelentése, csak annyit fejez ki, hogy a berendezés környezetével összhangban van. Ha képes változtatni állapotát, fizikailag már nem is lehet egyensúlyban. Ez az eset jellegzetes példa arra, amikor a kibernetikai állapotfüggvény nem a rendszer belső tulajdonsága.

A kibernetika fogalomköre rendkívül hasznosnak bizonyul olyan jelenségek tárgyalásában, amelyekről fizikai elképzelésünk még hiányos, vagy nincs is. Kvantitatívra teszi az elméletet, egységes, általánosan elfogadott terminológiára kényszerít. A reguláció, a szabályozás kérdését *Bauer* is fontosnak tartja, de fizikai tartalommal kapcsolja össze:

„Ha azt a munkát — ami az egyensúly ellen irányul és a rendszer potenciálkülönbségeit, tehát munkavégző képességét teremti meg —, regulációs tevékenységnek tekintjük, akkor mennyiségi elvünkéből következik, hogy csak regulációs életfolyamatok vannak, minden élettevékenység regulációs.” ([2], 309. old., [4], 51. old.) *Goodwin* sem akart pusztán kibernetikai modellt alkotni, bár molekuláris feltételeiben ilyenből indult ki. Kiválasztotta a biológiai rendszer mikrostruktúrájának néhány sajátos funkcionális elvét, és ezekből akarta a makroszkópos rendszer egyes sajátosságait megmagyarázni. A kibernetikai modell itt olyan szerepet játszott, mint a Newton féle mechanika a statisztikus gázelméletben. *Bauer* célja hasonló volt, de idejében az élő anyag molekuláris felépítéséről még oly keveset ismertek, hogy a fent említett „regulációs munkáról” mikroszkópos szinten még vázlatos képet sem alkothatt. A nemegyensúlyi állapot mikroszkópos feltételezéséből csak a „potenciálhoz” lehetett eljutni. ([2], 372; [4], 125.) Ez volt az elmélet egyetlen kvantitatív integratív makroszkópos fogalma.

„Sajnos módszereink nem elég érzékenyek, hogy közvetlenül mérhessük a sejtek és szövetek potenciálját.” ([4], 155. old.)

Ez egyben az elmélet gyengesége is. *Bauer* a „potenciál” változását az evolúció során kvantitatíve be tudja mutatni és be tudja bizonyítani, hogy az élő anyag „potenciálja” magasabb, mint az elhalt anyagé. ([2], 375; [4], 193. old.) Sokkal kevesebb adata marad azonban az ontogenezis folyamatára. *Bauer* szerint minden biológiai jelenség esetén fel kell tételezni a potenciál változását. Mivel a potenciál csak nő vagy csökken, viszont biológiai jelenség nagyon sokféle van, a legkülönbözőbb folyamatokat ugyanolyan függvény írja le. Hiányzik az a fogalom, mely a biológiai specifikitást fejezi ki. Hogy az immunológiánál maradjunk, ismert jelenség az, hogy antigén beoltása a nyirokapparátus sejtjeiben sejtosztódási és differenciálódási folyamatot indít meg. Az antigén bejuttatása olyan, mint egy jel, melyre egyes sejtek megváltoznak, oszlanak. Az a fizikai szempontból csekély potenciálváltozás, hogy egyes sejtekre antigénmolekulák abszorbeálódtak, megnyit egy energiazsilipet, mely sokkal nagyobb energiák mozgósításával — differenciált sejtek tömegének megjelenésében — realizálódik. Mivel az antigén bejuttatása inger, *Bauer* elmélete



szerint az élő anyag „potenciálja” ez esetben csökken [9]. Érthetetlen, hogy ez miért sejtosztódást vált ki, mikor ennek az az előfeltétele, hogy az „önemésztés”, „alapvető folyamat” révén a „potenciál” előzőleg emelkedjék. ([4], 153. old.)

Ezt a mondvacsinált ellentmondást csak azért írtuk le, hogy bemutassuk, mennyire megnehezíti a legegyszerűbb biológiai jelenség leírását is az információ, a jel fogalmának hiánya. Könnyű *Goodwin*nak, akinél már a mikroszkopikus kiindulópontban implicite szerepel ez a fogalom. Bár a sejtosztódást és a differenciálódást nem is próbálja megmagyarázni, feltételezi, hogy a különböző molekulák (sőt oszcillátorok) hatnak egymásra. Ilyen hatáshoz energiaértéket is hozzá lehet rendelni és ez esetben tényleg mindjárt potenciálváltozásnál vagyunk.

Végül is felmerül a kérdés, hogy miért kell egy olyan elmélettel foglalkozni, amelyet gyakorlati kérdésekkel kapcsolatban nem nagyon lehet felhasználni? — amelynek tényanyaga nagyrészt elavult? — amikor ma olyan tényekkel állunk szemben, melyekről ennek az elméletnek már nem lehet semmi mondanivalója?

A biológiában ma felmerül az az igény, hogy megtaláljuk makroszkópos biológiai jelenségek kapcsolatát molekuláris folyamatokkal (öröklődés szabályai — DNS szerkezete, izomműködés — izom mikrostruktúrája, látás — fényérzékeny molekulák stb.). Ezt az igényt nemcsak a kísérletezők kíváncsisága teszi szükségessé és az eszközök fejlettsége lehetségessé. Ezt a célkitűzést az teszi reálissá, hogy a biológia makroszkópos fegyvertényein túlmenően ma már újabb hasznos beavatkozások is lehetségesek. (Ilyen makroszkopikus fegyvertény volt pl. fajok keresztezése, növények metszése stb.) Ezek az újabb hasznos beavatkozások is tapasztalati eredetűek ugyanúgy, mint a makroszkopikus eszközök legnagyobb része volt. Azonban ezek-től eltérően molekuláris szintűek. (Ilyen pl. az antibiotikumok, gyomirtók, a szintetikus gyógyszerek használata stb.) Ahogy a makroszkopikus tények nyomán elmélet keletkezett, úgy a molekuláris tények nyomán is elmélet keletkezik. Az ilyen elméletnek egyik feladata az, hogy a molekuláris jelenségekből leszűrt fogalmakat kapcsolatba hozza a szervezetek szintjén absztrahált fogalmakkal.

Nos, *Bauer* számos évtizeddel ezelőtt felismerte, hogy ilyen elméletre szükség lesz, ez a továbbhaladás feltétele.

„Ha egy testnedvben a szokottnál nagyobb mennyiségben találunk egy bizonyos vegyületet, akkor ennek a ténynek azonnal jelentőséget tulajdonítunk. Mégis mind-  
eddig alig magyaráztak meg valamit az életfolyamatokból.” ([4], 210. old.)

Megmutatta, hogyan lehet a biológia tapasztalati anyagából makroszkópos és mikroszkópos fogalmakat absztrahálni, hogyan kell modellt alkotni, hogyan kell ezeket kapcsolatba hozni és használni. Mivel ezt előtte ilyen céltudatosan nem tették meg, ez az első oka annak, hogy érdemes munkáját tanulmányoznunk.

„Hiszen a természettudományban, éppen úgy, mint minden más tudományban, nem úgy van, hogy szilárd alapfogalmakból indulunk ki és ezek megvalósulását keressük a környező világban, hanem pont fordítva.”

„A tudomány a fogalmakat, amelyekkel dolgozik, nem készen találja; először mesterségesen meg kell alkotnia, és csak fokozatosan tökéletesítheti azokat.” ([12], 178, 172. old.)

A *Bauer* által kialakított fogalmak ma már természetesen célszerűtlenek vagy túlhaladottak lehetnek.

„Mások feladata megítélni, hogy az általunk felállított alaptételek megfelelően kielégítik-e azokat a követelményeket, amelyeket természettudományos alaptételekkel szemben támasztunk a biológiában. Reméljük, hogy egyelőre jól beválnak.”



Ha már nem bizonyulnak elegendőeknek, akkor újakat kell keresni; a biológiában, éppúgy, mint a fizikában, nem a jelenségek, hanem a konstruált összefüggések, a törvények változnak.” ([4], 210. old.)

Mint láttuk — ilyen fogalmak, „alapelvek” keresése ma is folyik. *Bauer* „alapelveiről” meg kell tudnunk mondani, hogy azok miért célszerűtlenek. Az újabb fogalmakról pedig meg kell mondanunk, hogy azok miért jobbak.

Ilyen elmélet megalkotásakor igen különböző szakterületek tényanyaga és fogalmai kerülnek egymás mellé. Manapság alig van olyan képzésű ember, aki jártas lenne ennyire különféle területeken.

„Tehetségükkel a többi ember fölé magasló emberek kötelesek önmagukat és az utókort is respektálni, amikor arról van szó, hogyan használják fel idejüket.” ([7], LIV. 54. old.)

*Bauer* könyvét elolvasva egy fizikus képzettséggel nem rendelkező biológus is megérzi, hogy milyen hasznos eszköz lehet a biológiában az elmélet. *Bauer* példamutató abban, hogy mennyire kell jártasnak lenni különböző szakterületek fogalmi körében és ezeket hogyan kell kritikusnak használni. Ez a másik ok, amiért érdemes tanulmányozni művét.

Hangsúlyozzuk, nem azt akarjuk mondani, hogy az elmélet fontosabb, mint a tények.

„Ha meggondoljuk, hogy egy gondolat megfogalmazásánál mindig két különböző tényt kell egymásra vonatkoztatni, akkor már a kombinatorika formális szabályaiból következik, hogy az egyáltalában lehetséges eszmék száma egy teljes nagyságrenddel nagyobb, mint a választékul szolgáló tények száma.” ([12], 165. old.)

Az elméletek változnak és mindig újak jönnek. Ugyanúgy, ahogy nem kérdezzünk olyat, hogy melyik elmélet „igaz”, a Bohr-féle atomelmélet vagy a hullámmechanika atommodellje — ugyanúgy értelmetlen felvetni azt a kérdést, hogy *Bauer* elmélete igaz-e, vagy a modernebb elméletek.

Bár *Bauer* elmélete különleges helyet foglal el a biológiai elméletek között, ha a fenti okokból kellene tanulmányoznunk, akkor csupán tudománytörténeti érdekesség lenne. Elmélete azonban tartalmaz egy fontos felismerést — úgy is mondhatnánk, tényt —, melyet igen általánosan fogalmaz meg. Ez a felismerés az „inaequilibrium tétel”, mely más — kevésbé általános — alakban újabb elméletekben is felmerül. Ez a harmadik ok, amely miatt elmélete ma sem avult el. Lehetséges, hogy ez valóban annyira alapvető felismerés, hogy az „élő anyagról” alkotott modellben nélkülözhetetlen lesz. Lehetséges, hogy ennek az elvnek a figyelembevétele fontos lépést jelent a mikrostruktúráról alkotott elképzelésünkben és ezért szerepelnie kell minden általános biológiai elmélet axiómái vagy végkövetkeztetései között.



## IRODALOM

1. *Abonyi I., Elek G.*, Fizikai Szemle 16, 111, 1966.
2. *Abonyi I., Elek G.*, Fizikai Szemle 17, 304, 369, 1967.
3. *Ashby, W. R.*: An Introduction to Cybernetics. Chapman and Hall, London. 1956. Oroszul: Izd. Inosztrannoj Lit. Moszkva, 1959.
4. *Bauer E.*: Elméleti Biológia. Akadémiai Kiadó. Bp. 1967.
5. *Bauer E.*: Sztruktura Zsivovo vescu sztv. In: Szovremennüe problemü teoreticeszkoi megycinü. 1. kötet, Ogiz. Leningrád—Moszkva. 1936. 28. old.
6. *Bühovszkij, A. I.*, Dokladü Akad. Nauk.: 171, No —4, 992, 1966.
7. *Diderot*: Gondolatok a természet értelmezéséről. Filozófiai Írók Tára, 12 kötet 54 old. Franklin T. Bp. 1915.
8. *Elek G.*: Fizikai Szemle 18, 180, 215, 1968.
9. Egy nem említett Bauer emlék. Orvosi Hetilap, 109, 873, 1968.
10. *Goodwin, B. C.*: Temporal Organisation in Cells. Academic Press. London—New York. 1963. Oroszul: Mir, Moszkva, 1966.
11. Information Theory in Biology. Pergamon Press, London, 1956. Oroszul: Inosztrannoj Lit. Moszkva, 1960.
12. *Planck, M.*: Válogatott tanulmányok. Gondolat. Bp. 1965.
13. *Setlow-Pollard*: Molecular Biophysics. Addyson-Wesley. London. 1962. Oroszul: Mir, Moszkva, 1964.
14. *Snol, Sz. E., A. M. Zsabotyinszkij*: Előszó [10] orosz kiadásához.
15. *Szilárd, L.*: Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.: 46, 277, 239, 1960.







# AZ IZOKRÓN CIKLOTRONOK ÉS ALKALMAZÁSAIK

FÉNYES TIBOR

MTA Atommag Kutató Intézet, Debrecen, 1969\*

## I. Bevezetés

- A) Az izokrón ciklotronok
- B) Az izokrón ciklotronok alkalmazási területei

## II. A hagyományos ciklotronok

- A) Működési elv, alapegyenletek
- B) A nyaláb vertikális és horizontális fókuszálása
- C) Az elérhető maximális részecske energiák és intenzitások

## III. Az izokrón ciklotronok

- A) Működési elv, alapegyenlet
- B) A nyaláb vertikális és horizontális fókuszálása
- C) Az elérhető maximális részecske energiák és intenzitások
- D) Különböző részecskék gyorsítása és a kihozott nyaláb energiájának változtatása
- E) A nyaláb energiaszórása
- F) A nyaláb fázistér sűrűsége
- G) A szektorfókuszálási elv előnyei nem relativisztikus ciklotronnál
- H) Az izokrón ciklotronokkal kapcsolatos néhány részletkérdés
  - 1. Ionforrás, központi tartomány
  - 2. Rádiófrekvenciás (RF) rendszer
  - 3. A mágneses tér
  - 4. A belső nyaláb sajátosságai, a nyalábvesztés okai
  - 5. A nyaláb kihozása a ciklotronból
  - 6. Vákuum
- I) Monoenergetikus izokrón ciklotronok

## IV. Az izokrón ciklotronok alkalmazási területei

- A) Izotóptermelés
  - 1. A hozamintenzitások összehasonlítása különböző izotóptermelő berendezéseknél
  - 2. Az izotópok felhasználása magspektroszkópiai alapkutatásra
  - 3. Az izotópok felhasználása gyógyászati, biológiai, kémiai, műszaki kutatási és ipari célokra
- B) Atommag-reakciók vizsgálata
  - 1. A magreakció vizsgálatok energiaigénye
  - 2. Az izokrón ciklotronokkal különösen előnyösen vizsgálható magreakció típusok
  - 3. Neutron nyalábok előállítása különböző magreakciókkal
- C) Egyéb alkalmazások
  - 1. Aktivációs analízis
  - 2. Sugárgyógyászat, sugárbiológia
  - 3. Szilárd test fizika, sugárkémia
  - 4. Kémiai és izotóp analízis szórt nehéz ion nyalábbal

## V. Néhány ciklotron jellemző adatai

\* Érkezett 1969. szept. 15.



## I. Bevezetés

### I. A. Az izokrón ciklotronok

A ciklotronok korszerű formája, az izokrón vagy más néven szektor fókuszálású ciklotron\* (a továbbiakban: SFC) sokrétű felhasználhatósága miatt különösen alkalmas arra, hogy egy kis ország nehéz részecske gyorsítóval kapcsolatos igényeit kielégítse.

Az izokrón ciklotronok legfontosabb tulajdonságai a következők:

a) A szolgáltatott nyaláb árama nagy; több nagyságrenddel nagyobb, mint az azonos energiájú nyalábot szolgáltató szinkrociklotronoké.

b) A SFC-okkal, eltérően a klasszikus ciklotronoktól, relativisztikus energiákra is lehet gyorsítani részecskéket.

c) A kihozott nyaláb energiáját viszonylag egyszerűen és gyorsan lehet változtatni, ami mind kutatási, mind alkalmazási szempontból fontos.

d) A SFC-okkal mind könnyű, mind nehéz ionok gyorsíthatók.

e) Az izokrón ciklotronokból kilépő nyaláb a kutatás (különösen magreakció vizsgálatok) szempontjából sok más kiváló sajátossággal is rendelkezik. Pl. előállíthatók intenzív, közel paralel nyalábok úgy, mintha azok igen kis méretű forrásból lépnének ki. Ez a szórásvizsgálatoknál és a reakciótermékek szögeloszlás mérésénél fontos. A kis effektív forrásméret szükséges a nyaláb energiahomogenizálásához is. Mágneses monokromátorral elérhető  $10^{-4}$ -es energiahomogenitás, miközben az áram még  $1 \div 10 \mu\text{A}$  marad. A monoenergetikus ciklotronok kifejlesztése reményt ad az energiahomogenitás és nyalábjelintenzitás további növelésére is. Ez azt jelenti, hogy az energiahomogenitás terén a SFC-ok állják a versenyt az elektrosztatikus tandem generátorokkal, ugyanakkor mind a nyaláb energiája, mind az intenzitása tekintetében felülmúlják azokat.

f) A szektor fókuszálási elv lehetővé teszi, hogy a ciklotron mágnespólok közötti távolságot csökkentjük, ami a mágnes árának és az üzemeltetés költségeinek csökkentéséhez vezet. Ezért még nem relativisztikus energiájú ciklotronoknál is előnyökkel jár a szektor fókuszálási elv alkalmazása.

### I. B. Az izokrón ciklotronok alkalmazási területei

A ciklotronok főbb alkalmazási területei a következők:

a) Reaktorral elő nem állítható, főleg neutron hiányos izotópok termelése. A nyert izotópok felhasználhatók mind alapkutatói (magspektroszkópia, kémia, biológia, farmakológia stb.), mind ipari, mezőgazdasági, gyógyászati célokra. Bizonyos elemeknél csak a neutron hiányos izotópok között van — a gyakorlati felhasználás szempontjából — megfelelően hosszú felezési idejű izotóp, amiket reaktorban nem lehet előállítani (pl.  $^7\text{Be}$ ,  $^{13}\text{N}$ ,  $^{15}\text{O}$ ,  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{48}\text{V}$  stb.). A ciklotronban előállított izotópoknál könnyebb nagy fajlagos aktivitásokat elérni, mint a reaktoroknál, mivel a töltött részecske reakciók általában a céltárgy elem megváltozását

\* Megjegyzés. Az irodalomban a két elnevezést gyakran vagylagosan használják, bár szigorúan véve lehetséges, hogy pl. a (szinkro-) ciklotron szektor fókuszálású, de nem izokrón. L. III. A. fejezetet.



eredményezik és így kémiai szeparálásra lehetőség nyílik. Orvosdiagnosztikai alkalmazások szempontjából igen fontos a  $^{11}\text{C}$  ( $T_{1/2} = 20$  min), a sugárterápia szempontjából a  $^{63}\text{Zn}$  előállítás. További, a gyakorlat szempontjából fontos ciklotron termelte izotópok:  $^{74}\text{Ar}$ ,  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{52}\text{Fe}$ ,  $^{57}\text{Co}$  stb., összesen mintegy 40 db. Ciklotronokkal távoli transzurán elemek is előállíthatók.

b) Atommag-reakciók vizsgálata.

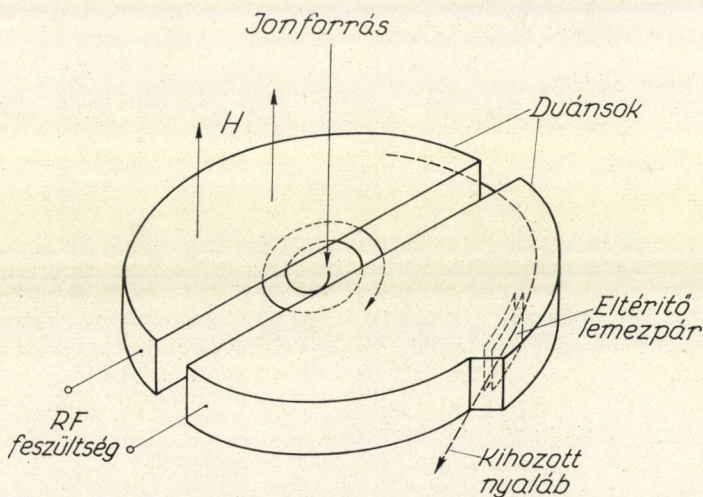
c) Aktivációs analízis: minták kémiai összetételének megállapítása. A módszer az összes többi analitikai módszer érzékenységét felülmúlja, kedvező esetben  $10^{-12}$  gr szennyezés kimutatását is lehetővé teszi.

d) Sugárkémiai, sugárbiológiai kutatások.

## II. A hagyományos ciklotronok

### II. A. Működési elv, alapegyenletek

A klasszikus ciklotron [1] működési elvét az 1. ábra szemlélteti. A közepén elhelyezett ionforrásból az ionok a duánsokra adott váltakozó nagyfrekvenciás feszültség hatására oldalirányban kilépnek és felgyorsulnak, majd a merőlegesen alkalmazott mágneses tér a duánsok körül körpályára kényszeríti őket. Ha a gyorsító feszültség frekvenciáját megfelelően állítjuk be, félkör lefutása alatt a feszültség



1. ábra. Az iongyorsítás elve a ciklotronban

előjelet vált, így az ionok a duánsok közötti térrészben ismét gyorsulni fognak. E folyamat sokszor ismétlődik, közben a részecskék táguló spirálpályán haladva egyre nagyobb energiára tesznek szert. A végsugáron a nyáláb két eltérítőlap közé kerül. Ezekre megfelelő elektromos feszültséget adva az ionok kihozhatók a gyorsító vákuum kamrájából.



A mágneses térben, körpályán mozgó ionra ható centrifugális erő egyensúlyban van a Lorentz-erővel, azaz

$$\frac{mv^2}{r} = 0,1 eZ vH, \quad (1)$$

ahol  $m$  az ion tömege, gr,  
 $eZ$  az ion töltése, Coulomb,  
 $v$  az ion sebessége,  $\text{cm sec}^{-1}$ ,  
 $r$  az ion pályasugara, cm,  
 $H$  a mágneses térerősség, Oe.

Az egyenlet átrendezéséből adódik, hogy a keringési frekvencia ( $f$ ) a következőképpen írható le:

$$f = \frac{v}{2\pi r} = \frac{0,1 eZ H}{2\pi m}. \quad (2)$$

Ez az egyenlet a ciklotron alapegyenlete; azt az igen fontos tényt mutatja, hogy a keringési frekvencia nem relativisztikus esetben független az ion energiájától és csak az  $eZ/m$  értékétől, illetve a mágneses térerősségtől függ, azokkal arányos. A duánsokra adott feszültség frekvenciáját úgy kell megválasztani, hogy a keringési frekvenciával összhangban legyen.

Az (1) egyenletből következik, hogy az ionok maximális energiája,  $E_{\max}$ :

$$E_{\max} = 0,01 \frac{(eZ)^2}{2m} (Hr)_{\max}^2. \quad (3)$$

A képletből látható, hogy nagy energiák eléréséhez nagy pályasugarat kell biztosítani és így nagy pólusátmérőjű vasmagot, nagy vákuumkamrát stb. A mágneses térerősség növelését bizonyos határon túl a vasmag telítődése megakadályozza.

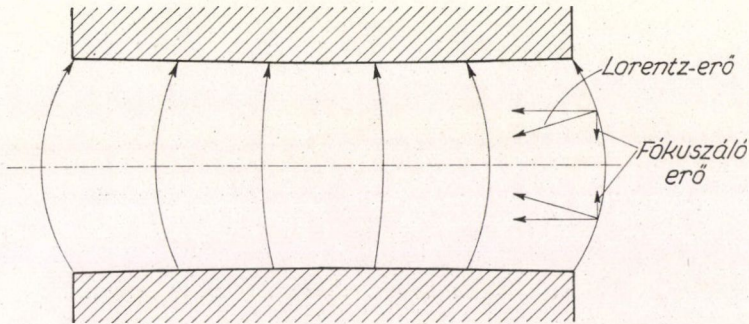
## II. B. A nyaláb vertikális és horizontális fókuszálása

A ciklotron nyaláb számottevő intenzitása érdekében biztosítani kell a nyaláb fókuszálását a spirálpályára; az ionforrásból kilépő részecskék irányszórása, az ionok ütközése a maradék gáz molekuláival stb. egyébként lényeges nyaláberősség gyengülést hozna létre. A nyaláb irányeltéréseit két csoportba oszthatjuk, amiket jó közelítésben külön-külön tárgyalhatunk: a vertikális (vagy más néven axiális) és horizontális (radiális) eltérések csoportjára.

A nyaláb vertikális, azaz a középsíkba való fókuszálását főleg a mágneses tér kismértékű sugár menti csökkentésével érik el. L. 2. ábra. Ebben a mágneses térben az erővonalak merőlegesek a középsíkra, de a középsík felett és alatt görbülnek. A Lorentz-erő merőleges a mágneses erővonalakra, így lesz egy olyan komponense, ami a részecskéket a középsík felé kényszeríti, akár felfelé, akár lefelé tértek is ki belőle. E fókuszáló erő hatására az ionok rezgéseket végeznek a középsík körül, amiket axiális „betatronrezgéseknek” nevezünk.

A nyaláb horizontális, azaz a középsíkban a megfelelő pályára való fókuszálását szintén a mágneses térerősség sugár menti megfelelő csökkentésével érik el. Legyen a részecske sebessége  $v$ , az ehhez tartozó sugár  $r$ , ami az (1) egyenletből számolható.





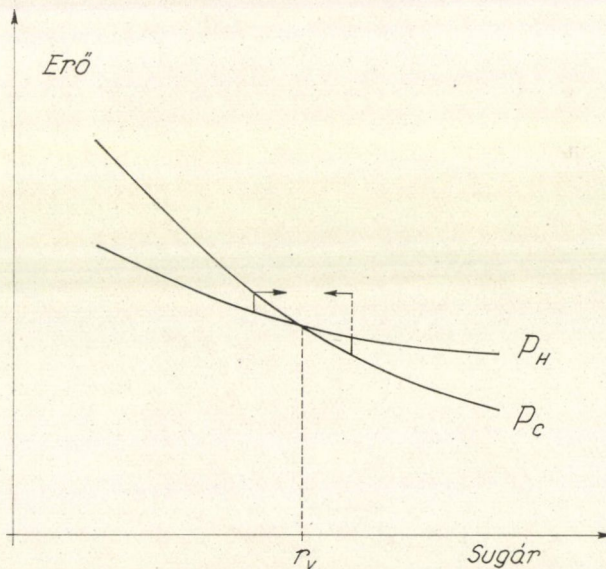
2. ábra. A mágneses erővonalak alakja a hagyományos ciklotronban.  
A vertikális (axiális) fókuszálás

A  $v = \text{konst.}$  sebességű ionra ható centrifugális erő  $\frac{mv^2}{r}$ ; a Lorentz-erő:  $0,1 \cdot eZ \cdot v \cdot H$ .

Ha a mágneses térerősség sugárfüggését úgy választjuk meg, hogy

$$H = H_0 r^k$$

legyen, ahol  $H_0 = \text{konst.}$  és  $-1 < k < 0$ , akkor a Lorentz-erő a sugárral csökken, de lassabban, mint a centrifugális erő. L. 3. ábra. Ez azt eredményezi, hogy ha a  $v$



3. ábra. Horizontális (radiális) fókuszálás a hagyományos ciklotronban.  $r_v$  a pillanatnyilag rögzített  $v$  részecskesebességhez az (1) formula által hozzárendelt sugár.  $P_H = 0,1 eZvH = 0,1 eZvH_0 r^k$ , ahol

$$-1 < k < 0. \text{ A centrifugális erő } P_c = \frac{mv^2}{r}$$

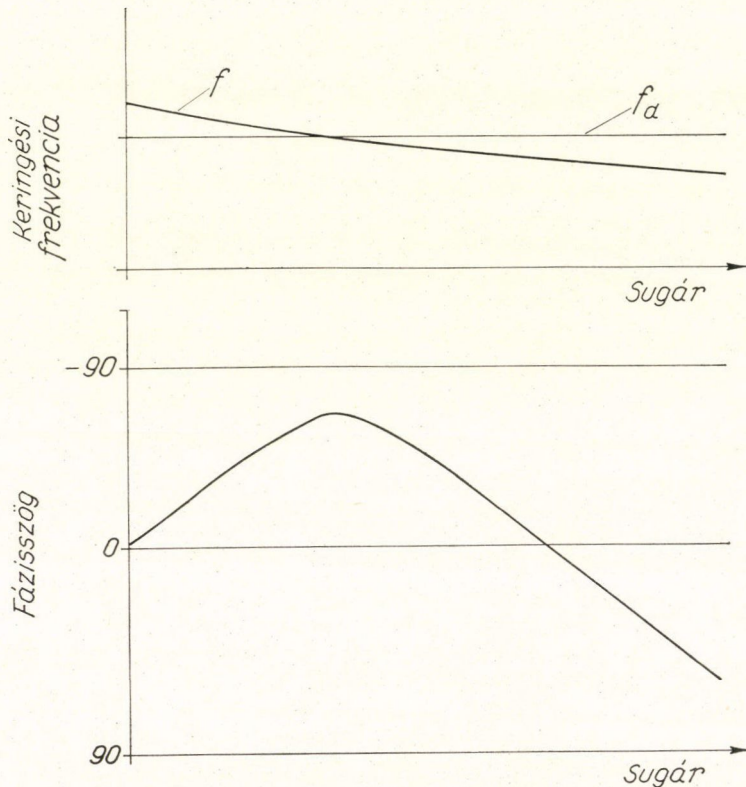


sebességű ion nagyobb sugárra kerül, mint az (1)-ből következő  $r_v$ , a ráható Lorentz-erő nagyobb lesz, mint a centrifugális erő, azaz a részecske pályasugara csökken az eredő erőhatás miatt. Fordítva: ha a  $v$  sebességű ion kisebb sugárra kerül, mint az  $r_v$ , akkor a centrifugális erő lesz nagyobb a Lorentz-erőnél és a részecske sugara nőni fog.

A mágneses térerősség sugár menti megfelelő csökkenésével tehát vertikális és horizontális fókuszálás érhető el. Az ilyen elven történő fókuszálást gyenge fókuszálásnak nevezzük.

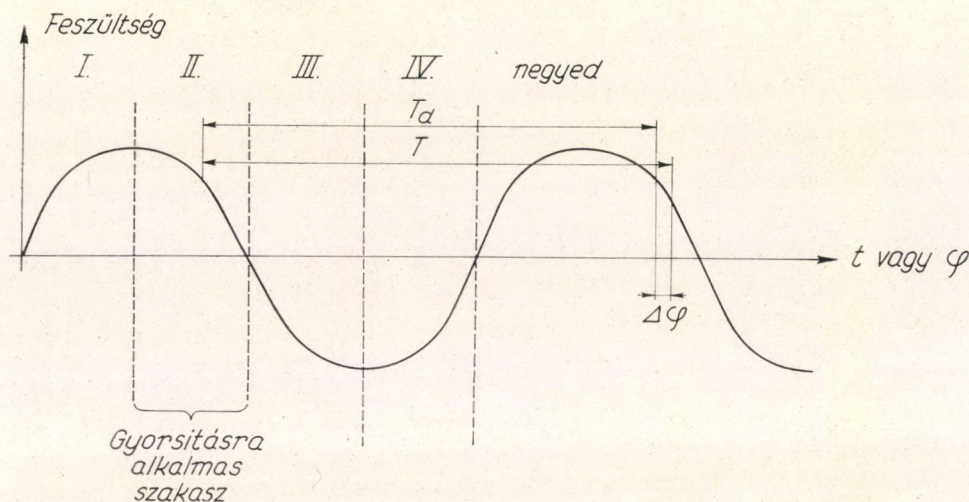
### II. C. Az elérhető maximális részecske energiák és intenzitások

A klasszikus ciklotron állandó gyorsítófrekvenciával működik. Az elérhető határenergiát elsősorban ez szabja meg, ugyanis a részecskék keringési frekvenciája a növekvő energiával (keringési sugárral) csökken és egy határon túl a részecske kiesik a gyorsítófeszültség fázisából, a duánsok között fékező elektromos térbe kerül.



4. ábra. A részecske keringési frekvenciája ( $f$ ) a hagyományos ciklotronnál a sugár függvényében.  $f_d$  a duánsfeszültség frekvenciája. Az alsó ábra a részecskék fáziseltolódását mutatja a gyorsítófeszültséghez képest a fenti frekvenciaviszonyoknál

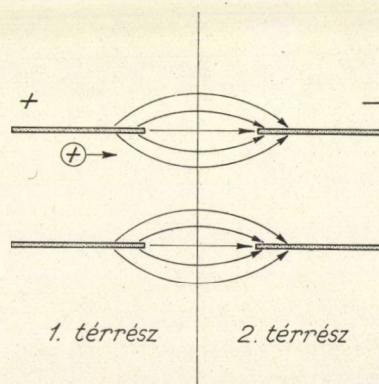




5. ábra. A duánsfeszültség változása az idő:  $t$  (vagy fázisszög:  $\varphi$ ) függvényében. Gyorsításra az ionforrásból az I., III. és IV. szakaszban kilépett részecskék általában nem használhatók.  $T$  = az az idő, ami a részecske egy körbefutásához szükséges.  $T_d$  a duánsfeszültség frekvenciájának megfelelő „keringési” idő

A részecskék keringési frekvenciájának csökkenését a relativisztikus tömegnövekedés és a mágneses térerősség sugár menti fokozatos gyengülése okozza [l. (2) képlet]. A gyenge fókuszáláshoz szükséges a mágneses térerősség sugár menti csökkentése, de ez szükségképpen fáziseltolódáshoz vezet az állandó frekvenciájú gyorsító feszültséghez képest. A részecskék keringési frekvenciájának és a gyorsító feszültséghez viszonyított fázisszögének változását a sugár függvényében a 4. ábrán láthatjuk. A gyorsítófeszültség frekvenciájának megfelelő megválasztásával (hangolásával) elérhető, hogy csak nagy sugaraknál esik ki a nyáláb a rezonanciagyorsításból.

Könnyen belátható, hogy gyorsításra csak a második negyedben (l. 5. ábra) kilépett ionok használhatók, még akkor is, ha az ionforrás állandóan működik. A III. és IV. negyedben a pozitív ionokat nem vonja ki a duánsfeszültség a forrásból. Az I. negyedben kilépő ionok a pálya elején elektromos defókuszálódás miatt rendszerint elvesznek. A duánsok közötti elektromos erőteret a 6. ábra szemlélteti. Az első térrészben az ionok fókuszálódnak, a másodikban defókuszálódnak. Az első gyorsítási időnegyedben kilépett részecskéknél (l. 5. ábra) a fókuszáló hatás kisebb lesz, mint a defókuszáló, mert amíg a pálya kezdetén viszonylag lassan mozgó részecske az első térrészből átjut a másodikba, a gyorsító feszültség érezhetően



6. ábra. A duánsok között kialakuló elektromos erőter. A pozitív ionra az 1. térrészben fókuszáló, a 2.-ben defókuszáló erő hat



megnő. Minél többször halad át az első időnegyedben kilépett nyaláb a duánsok közötti térrészen, annál inkább széttartó lesz és végül a duánsok belső falába ütközik.

A klasszikus ciklotronban elérhető határenergia a következőképpen számolható. A részecske fázisának változása ( $d\varphi$ ) egy félkör alatt:

$$\frac{d\varphi}{dv} = \frac{d\varphi}{dE_{\text{kin}}} \frac{dE}{dv} = \frac{d\varphi}{dE_{\text{kin}}} e Z U \cos \varphi, \quad (4)$$

ahol  $v$  a félkörök száma,

$E_{\text{kin}}$  a részecske energiája a nyugalmi  $E_0$  energián kívül;  $E = E_0 + E_{\text{kin}}$ ,

ahol  $E$  a részecske teljes energiája,

$e Z U \cos \varphi$  az  $e Z$  töltésű részecske energianövekedése egy félkör alatt.

Másrészről a részecske fázisának félkörönkénti változása a következőképpen is kifejezhető:

$$\frac{d\varphi}{dv} = \pi \frac{T - T_d}{T_d}, \quad (5)$$

ahol  $T$  a részecskéhez,  $T_d$  pedig a duánsfrekvenciához tartozó periódus idő (l. 5. ábra).

Figyelembe véve a relativisztikus tömegnövekedést, a (2) összefüggés a következőképpen is felírható:

$$T = \frac{2\pi m}{0,1 e Z H} = \frac{2\pi m_0}{0,1 e Z H} \frac{1}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} = \frac{2\pi m_0}{0,1 e Z H} \left(1 + \frac{E_{\text{kin}}}{E_0}\right). \quad (6)$$

Behelyettesítve a (6) kifejezést az (5)-be nyerjük:

$$\frac{d\varphi}{dv} = \pi \frac{E_{\text{kin}}}{E_0}. \quad (7)$$

Egyenlővé téve a (4) és (7) kifejezést

$$E_{\text{kin}} dE_{\text{kin}} = \frac{E_0 e Z U}{\pi} \cos \varphi d\varphi,$$

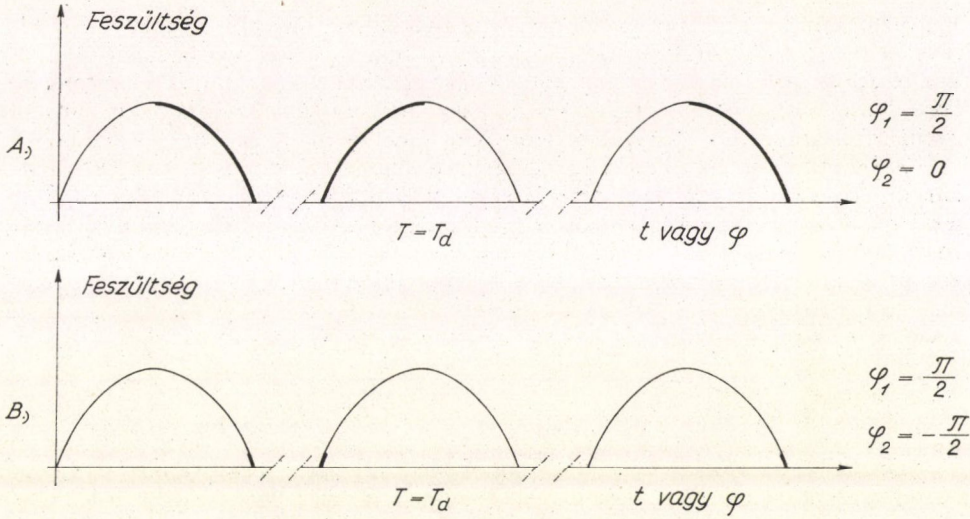
ahonnan integrálás után a következő eredményhez jutunk

$$E_{\text{kin max}} = \left\{ \frac{2E_0 e Z U}{\pi} (\sin \varphi_1 - \sin \varphi_2) \right\}^{1/2}. \quad (8)$$

Látható, hogy az elérhető maximális energia a duánsok feszültségétől és a fáziszögektől (ezen keresztül a hangolás módjától) függ. Maximális intenzitást úgy kapunk, ha a hangolás a gyorsított részecske tartomány 7a ábra szerinti eltolódását eredményezi. Ha kisebb fázistartományt használunk ki a gyorsításra, az intenzitás rovására nagyobb energiát nyerhetünk. L. 7b ábra.



A dunásokra néhányszor 100 kV-nál nagyobb feszültséget adni gyakorlatilag nem szoktak a fellépő átütésveszély miatt. Ez a maximális elérhető proton energiát 20 MeV körüli értékre szabja meg. Többszörösen töltött ionokra  $E_{\max}$  természetesen nagyobb is lehet. Hagyományos ciklotronokkal 1 mA belső protonáram különösebb nehézség nélkül elérhető.



7. ábra. A duánsfeszültség az idő függvényében. A gyorsításra ténylegesen felhasznált feszültség-szakaszokat vastag vonallal jelöltük. A) A maximális nyálábintenzitást szolgáltató hangolás. B) A maximális végenergiát szolgáltató hangolás

### III. Az izokrón ciklotronok

#### III. A. Működési elv, alapegyenlet

A ciklotronok (2) alapegyenlete a következő alakban is felírható:

$$H = \frac{2\pi m}{0,1 eZ} f = \frac{2\pi}{0,1 eZ} \frac{m_0}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} f.$$

Egyszerű átalakítás után következik, hogy

$$H = \frac{2\pi m_0}{0,1 eZ} f \left( 1 + \frac{\frac{1}{2} m_0 v^2}{m_0 c^2} \right),$$

$$H = H_0 \left( 1 + \frac{E_{\text{kin}}}{E_0} \right), \quad (9)$$



ahol

$$H_0 = \frac{2\pi m_0}{0,1 e Z} f,$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m_0 v^2,$$

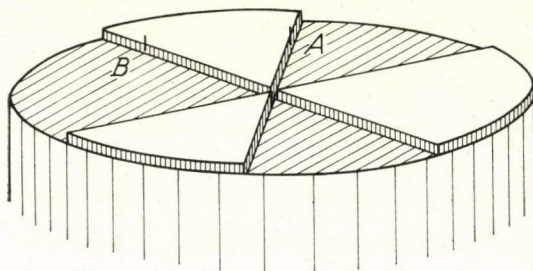
$$E_0 = m_0 c^2.$$

Ha biztosítani lehet, hogy a mágneses térerősség az energia (pályasugár) növekedésével a (9) összefüggésnek megfelelően nőjön, relativisztikus energiáknál sem esik ki a részecske a rezonancia gyorsításból. Világos azonban, hogy ez esetben újfókuszálási elvről kell gondoskodni, mivel a hagyományos ciklotronoknál alkalmazott gyenge fókuszálási elv a mágneses térerősség sugár menti csökkenését kívánja.

A következőkben megmutatjuk, hogy ha a mágneses teret szektorszerűen képezzük ki, elérhető, hogy az átlag térerősség a (9) összefüggésnek megfelelően növekedjék a részecske energiájával (a sugárral), ugyanakkor erős radiális és axiális fókuszáló hatás lépjen fel. Az ilyen elven működő gyorsítókat [2] nevezzük szektor fókuszalású ciklotronoknak (SFC) vagy más néven izokrón ciklotronoknak. Ez utóbbi elnevezés arra utal, hogy egyenlő idők szükségesek a körpályák befutásához, függetlenül a részecskék energiájától és relativisztikus tömegnövekedésétől.

### III. B. A nyaláb vertikális és horizontális fókuszálása

Legyen a ciklotron mágnespofáinak kiképzése a 8. ábrának megfelelő. A részecskék pályája az ilyen mágnespofák mellett létrehozott mágneses térben eltér a kör alaktól. L. 9. ábra. Az új pálya mentén a részecskéknek az A pontban kifelé, a B pontban befelé irányuló sugár menti sebességkomponense is van. E radiális komponenseken keresztül a részecskékre erős vertikális (axiális) fókuszálás lép fel, amit a 10. ábra segítségével beláthatunk.



8. ábra. Egy izokrón ciklotron alsó mágnespofája.  
A felső ugyanilyen

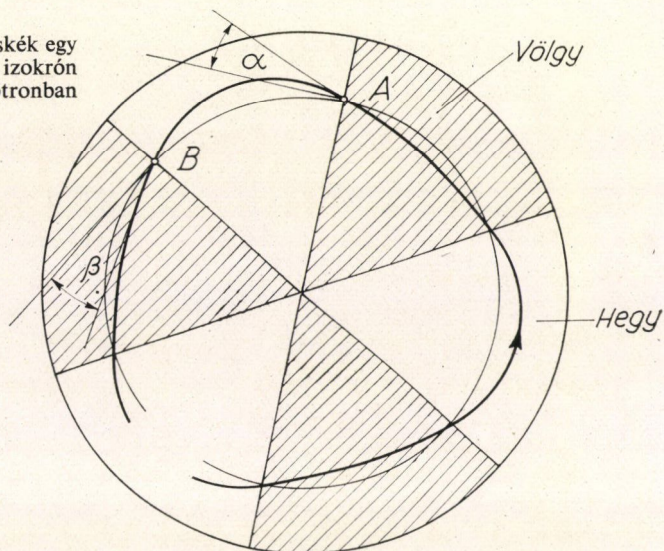
A vertikális fókuszáló hatás növelhető, ha a szektorokat spirálkar alakúra képezzük ki (11. ábra). A spirálkaros szektortérnél az  $\alpha$  és  $\beta$  szög megváltozik a radiális szektortérhez képest, és a változás eredményeként erősebb fókuszáló hatás lép fel. A spirálkaros szektortér fontos jellemzője a  $\gamma$  szög (11. ábra), amit a későbbi számításoknál felhasználunk.

A SFC-okban a horizontális fókuszálás mindig sokkal erősebb, mint a hagyományos ciklotronokban, mivel a sugár növekedésével az átlag térerősség növekszik. L. 12. ábra.

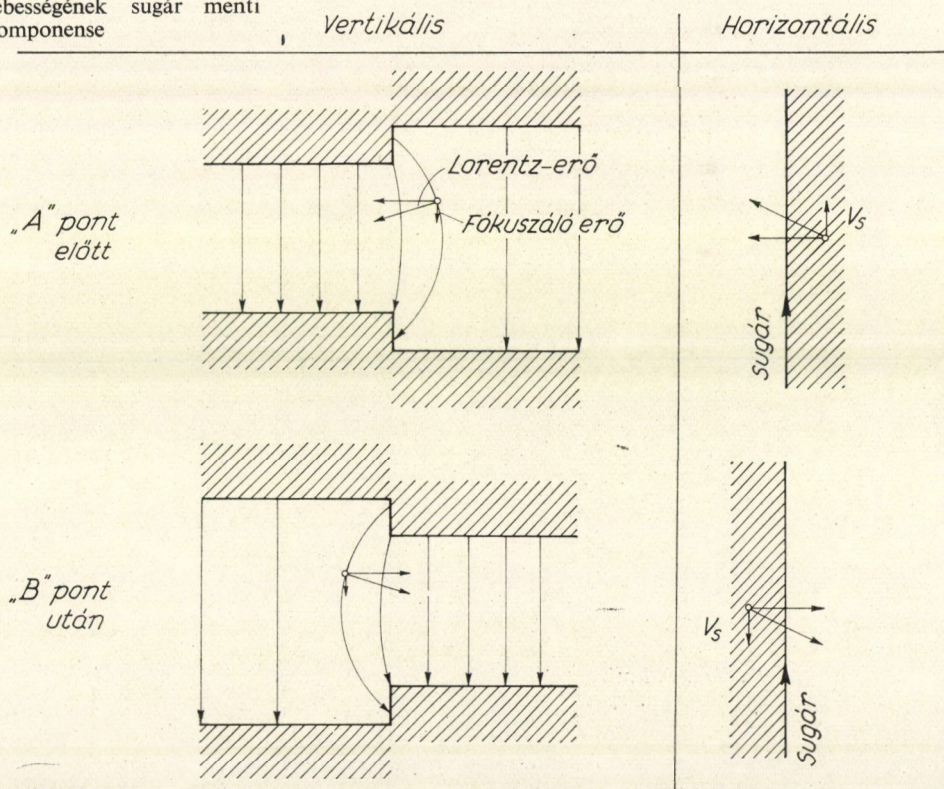
Ha a  $v$  sebességű részecske valamilyen ok miatt nagyobb sugárra kerül, mint az (1) formula alapján számolható  $r_v$ , erős centripetális Lorentz-erő fog rá hatni; és fordítva: az  $r_v$ -nál kisebb sugárról az erős centrifugális erő kifelé taszítja a részecskét.



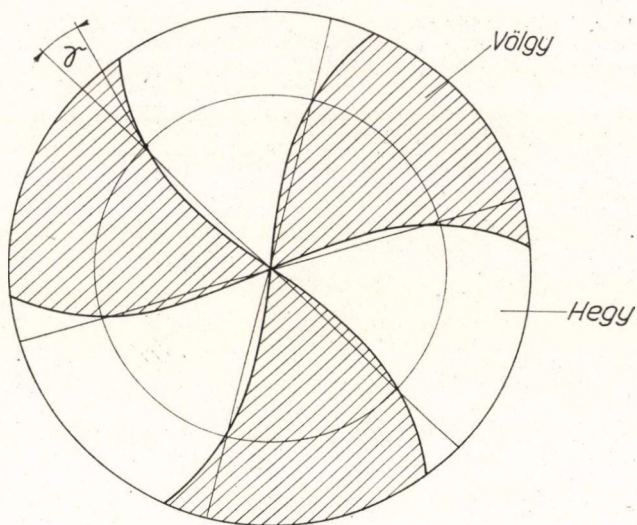
9. ábra. A részecskék egy pályaszakasza izokrón ciklotronban


 10. ábra. A vertikális (axiális) fókuszáló hatás szemléltetése izokrón ciklotronokban. Az A és B pont helyzetére l. a 8. és 9. ábrát.  $V_s$  a részecske sebességének sugár menti komponense

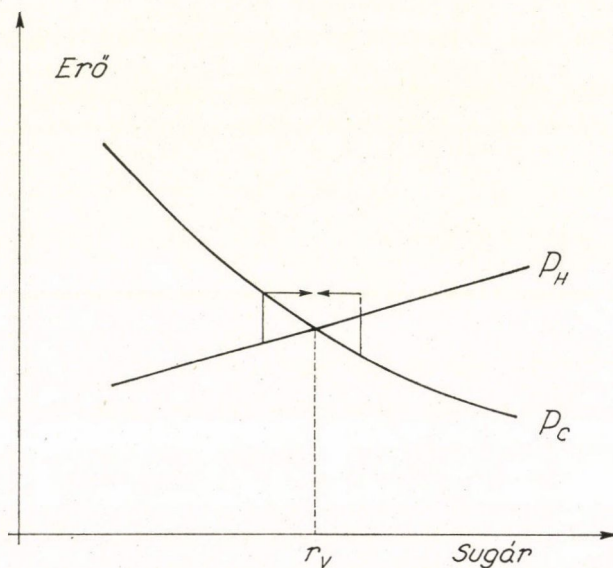
## METSZETEK







11. ábra. Izokrón ciklotron mágnespofája spirálkaros kiképzéssel.  $\gamma$  a sugár és a spirálkar érintője által bezárt szög



12. ábra. A horizontális (radiális) fókuszálás létrejötte izokrón ciklotronban.  $r_v$  a pillanatnyilag rögzített  $v$  sebességű ionhoz az (1) formula által hozzárendelt sugár.  $P_H = 0,1 \text{ eZvH}$ .

A centrifugális erő  $P_c = \frac{mv^2}{r}$



### III. C. Az elérhető maximális részecske energiák és intenzitások

A SFC-okkal elérhető maximális energiaértékeket a vertikális és horizontális rezgések frekvencia kifejezéséből szokták kiszámítani, mivel ezek a SFC-ok működésének legkritikusabb pontjai. Anélkül, hogy a levezetést [3, 16] részleteznénk, közöljük, hogyan függ a vertikális rezgések frekvenciája ( $f_z$ ) a részecskék keringési frekvenciájától ( $f$ ):

$$f_z^2 = \left[ -k + \frac{N^2}{N^2 - 1} F(1 + 2 \operatorname{tg}^2 \gamma) \right] f^2,$$

ahol  $k$  a mágneses térerősség radiális függésére jellemző mennyiség,  $H_{k\ddot{o}z} = H_{k\ddot{o}z0} \left( \frac{r}{r_0} \right)^k$ ,

ahol  $k = \left( \frac{E_{kin}}{m_0 c^2} \right)^2 + 2 \frac{E_{kin}}{m_0 c^2}$ . Ha a gyorsított részecske kinetikus energiája kisebb, mint a nyugalmi energiája (proton esetében  $m_0 c^2 = 938$  MeV),  $k$  kifejezésében — közelítő számításoknál — az első tag elhagyható.

$N$  a pólus szektorszám, pl. a 8. ábrán  $N = 3$ .

$F = \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta H_{max}}{H_{k\ddot{o}z}} \right)_{r=konst.}^2$ , ahol  $\Delta H_{max} = H_{max} - H_{k\ddot{o}z}$  adott  $r$  sugár mentén.

Az  $F$  függvény a mágneses térerősség körpálya menti ingadozását jellemzi, ezért azimutális térfluktuáció (flutter) függvénynek nevezik;

$\gamma$  a spirál szöge (l. 11. ábra).

A szögletes zárójelben levő kifejezés első tagja a mágneses térerősség radiális növekedését jellemzi. Minél nagyobb a  $k$ , annál nagyobb a közepes mágneses térerősség defokuszáló hatása. A kifejezés második tagja a szektortér miatt fellépő vertikális fókuszálásra jellemző. Még lehetséges részecske gyorsítás számottevő intenzitással, ha legalábbis nem széttartó a nyaláb, azaz

$$k \approx \frac{2E_{kin}}{m_0 c^2} = \frac{N^2}{N^2 - 1} F(1 + 2 \operatorname{tg}^2 \gamma).$$

Innen a maximális elérhető energia:

$$E_{kin\ max} = m_0 c^2 \frac{N^2}{N^2 - 1} \frac{F_{max}}{2} (1 + 2 \operatorname{tg}^2 \gamma_{max}), \quad (10)$$

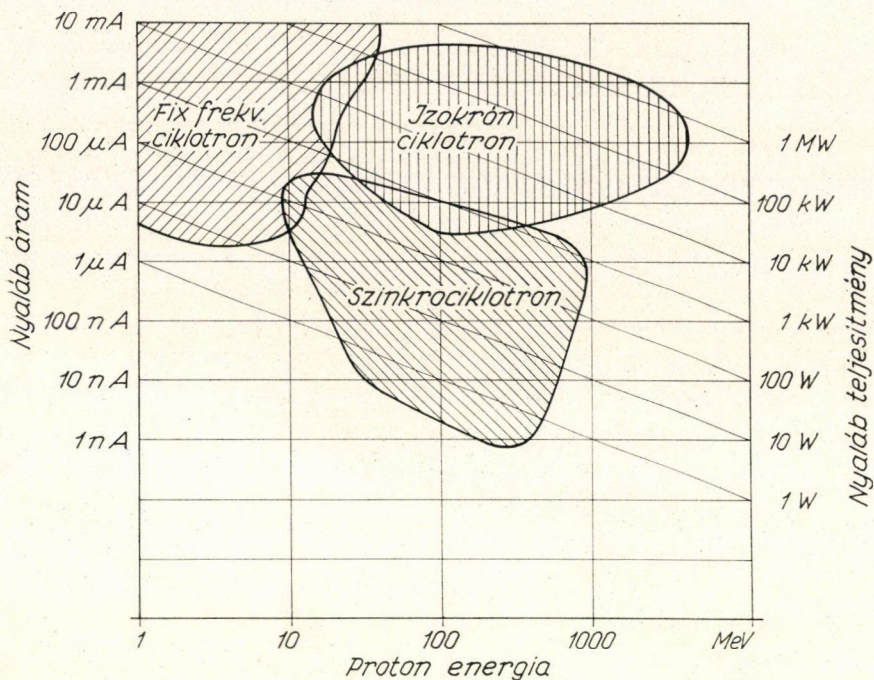
ahol  $\gamma_{max}$  a spirál szöge a maximális energiánál.

Az  $\frac{N^2}{N^2 - 1}$  viszonylag keveset változik  $N$ -el. Az  $F$  függvény gyakorlati növelésének határt szab a vákuum kamrában hagyandó lépés. Az elérhető maximális energia protonokra  $F_{max} = 0,1$ ,  $\gamma_{max} = 70^\circ$  és  $N = 3$  esetén a (10) formula szerint  $\sim 840$  MeV. E számítás az elérhető határenergianak csak a nagyságrendjét adja meg; pl. az  $F_{max}$  érték más megválasztása lényegesen befolyásolhatja az eredményt.

A radiális rezgések frekvenciájára kapott kifejezésből (l. pl. [16]) következik, hogy a szektorok számának ( $N$ ) növelése az elérhető határenergia növekedését vonja maga után. Túl nagy szektorszámot azonban nem szoktak választani, mert az  $N$  érték növelése a (10) kifejezés szerint az elérhető határenergia ellenkező hatást is gyakorol és a megvalósításnak technikai nehézségei is vannak.

Relativisztikus energiákra úgy is felgyorsíthatunk részecskéket, hogy a (2) össze-





13. ábra. Különböző gyorsítók protonnyalábjaik jellemző áram, energia és teljesítmény adatai. F. T. Howard [4] dolgozatából.

függésben nem a közepes mágneses térerősséget növeljük a sugár mentén, hanem homogén térerősség mellett a gyorsító feszültség frekvenciáját csökkentjük. Így jutunk el a szinkrociklotronokhoz, amik történetileg előbb valósultak meg, mint az izokróon ciklotronok. A szinkrociklotronokban a nyalábáram kicsi, mivel a spirálpályán csak egy részecskecsomagot lehet végiggyorsítani, míg a hagyományos és SFC-okban a frekvencia állandósága miatt többet is.

A SFC-ok megjelenése lehetővé tette, hogy relativisztikus energiákra is felgyorsítsunk részecskéket anélkül, hogy intenzitás csökkenés következett volna be a hagyományos ciklotronok nyalábáramához képest. A fejlődés jól látható az F. T. Howard-tól átvett 13. ábrán, ami áttekintést ad a működő és tervbe vett ciklotronok proton energia — nyalábáram karakterisztikáiról [4].

A gyorsított nyaláb egyik jellemzője az ún. „duty” faktor, ami megadja, hogy a gyorsítási idő hány %-ában van ténylegesen gyorsított nyaláb. Még ha az ionforrás állandóan ég, akkor is csak legfeljebb 50% lehet a duty faktor értéke, mert csak az egyik irányú gyorsító feszültség vonja ki az ionokat. A gyakorlatban, különböző okok miatt, értéke sokkal kevesebb, a nyalábban a részecskék csak rövid „csomagokban” érkeznek. Pl. a berkeleyi 224 cm-es izokróon ciklotronban minden impulzus  $\sim 16$  nsec hosszúságú, ha a frekvencia 9 Mc, így csak a teljes idő 14%-ában van nyaláb [5]. Alacsony duty faktor hátrány gyors koincidencia méréseknél. Ha azonban a mérőberendezés időállandója hosszú az egyes részecske csomagok időtartamához képest, a nyaláb gyakorlatilag folytonosnak tűnik. Ilyenkor „a makroszkópikus duty faktor” 100%.



### III. D. Különböző részecskék gyorsítása és a kihozott nyaláb energiájának változtatása

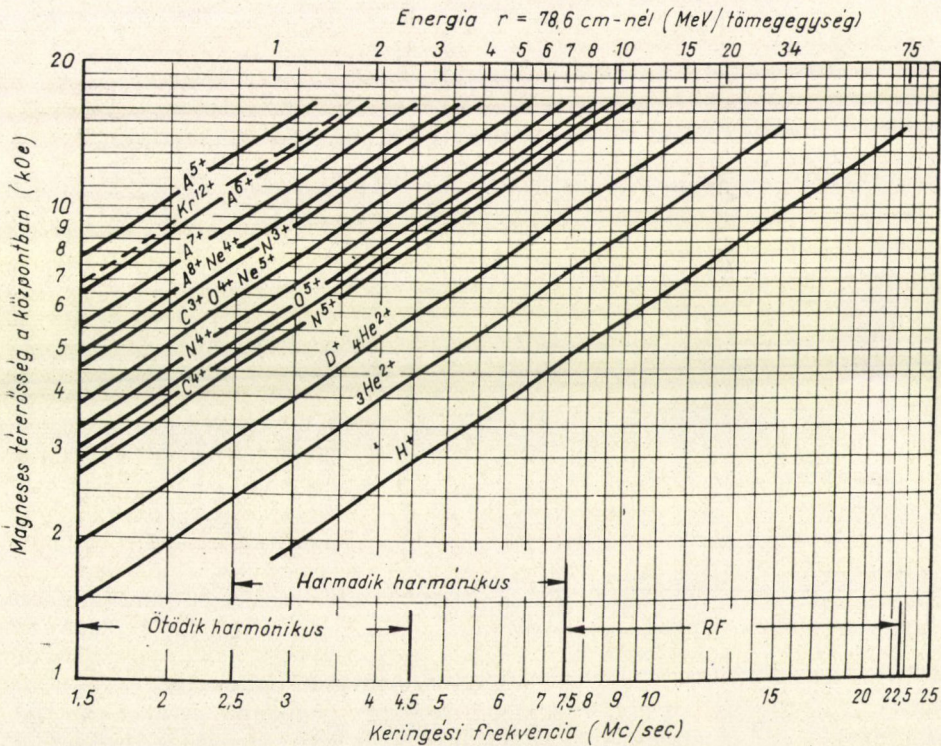
A korszerű ciklotronokat általában úgy tervezik, hogy többféle ion gyorsítására is alkalmasak legyenek és a végsugárról kihozott nyaláb energiáját lehessen változtatni. Az

$$E_{\max} = \frac{e^2}{2m} (H_{\text{köz}} r_{\max})^2$$

és

$$f = \frac{e}{2\pi m} H_{\text{köz}}$$

összefüggésekből következik, hogy állandó végsugar mellett úgy lehet különböző energiájú részecskéket nyerni, ha a közepes térerősséget ( $H_{\text{köz}}$ ) megváltoztatjuk és ezzel együtt a  $f$  rádiófrekvenciát is. A generátor frekvenciáját nehéz 3:1 vagy 2:1 aránynál szélesebb tartományban változtatni. Lehetőség van azonban arra, hogy alharmonikusokon gyorsítsunk, azaz míg a részecske az egyik duánszon belül van, a gyorsító feszültség értéke többször is előjelet váltson. Megfelelő konstrukcióval



14. ábra. Az Oak Ridge-i izokrón ciklotron különböző rezonanciai lehetőségei. R. J. Jones és munkatársai [6] dolgozatából



elérhető, hogy pl.  $p$ -okat 2-től 75 MeV-ig terjedő tartományban ki lehet hozni a SFC-ből.

A 14. ábrán látható, milyen összefüggésben vannak egymással a centrumban mért mágneses térerősség ( $H_0$ ), a részecskék keringési frekvenciája ( $f$ ) és az egy nukleonra eső energia az Oak Ridge-i 193 cm pólusátmérőjű izokrón ciklotronnál [6].

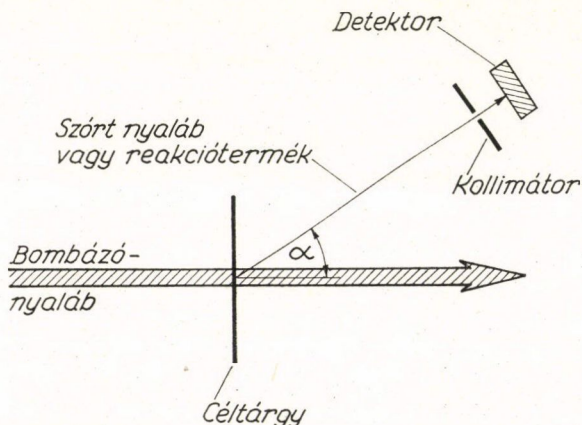
Amikor a gyorsítandó ionok típusát vagy a végsugárról kihozott nyaláb energiáját változtatjuk, nemcsak a közepes mágneses térerősséget kell változtatni tudni, hanem a mágneses térerősség sugár menti eloszlását is. Erre azért van szükség, mert a relativisztikus tömegnövekedés mértéke más és más nehéz, ill. könnyű ionokra vagy ugyanazon ionoknál kis, ill. nagy energiáknál. A gyorsító középpontjával koncentrikusan elhelyezett segédtekercekkel (trim tekercek) a mágneses térerősség sugár menti eloszlása változtatható.

### III. E. A nyaláb energiaszórása

A hagyományos ciklotronok külső nyalábjának energiaszórása  $\Delta E/E \approx 1\%$  körüli érték. A nyaláb intenzitás eloszlása általában Gauss-függvény alakú az energia függvényében;  $\Delta E$  a csúcs félértékszélessége az intenzitásmaximumhoz tartozó  $E$  energiánál. A SFC-ok energiahomogenitása valamivel jobb, 0,4–0,5%, de a nyaláb-pályák pontos centírozása és az eltérítő elektromos feszültség megfelelő megválasztásával 0,1–0,3% is elérhető. Ezen túlmenően mágneses analízálást [8] is lehet alkalmazni, amivel olyan nagyfokú energiahomogenitás biztosítható, mint az elektrosztatikus gyorsítóknál.

A Michigani Állami Egyetem ciklotronjához építettek olyan mágneses analízátort, ami 5 keV energia félérték-szélességű nyalábot szolgáltat [7]. Mágneses monokromátorral a Szovjetunióban készülő 240 cm pólusátmérőjű SFC-ban, ami  $p$ -okra 7,5–100 MeV energiákat ad,  $10^{-4}$ -es homogenitásban elérhető a tervek szerint, miközben az áram még  $1 \div 10 \mu A$  érték marad [9].

L. még a III. I. részt a monoenergetikus izokrón ciklotronokról.



15. ábra. Jellemző kísérleti berendezés a szórt nyaláb vagy a reakciótermékek szögeloszlásának vizsgálatára

### III. F. A nyaláb fázistér sűrűsége

Magreakcióknál igen gyakori feladat a nyaláb szóródásának vagy a reakciótermékek szögeloszlásának vizsgálata. A 15. ábra bemutat egy szögeloszlás mérésére szolgáló jellegzetes kísérleti berendezést.

A kísérlet szempontjából fontos, hogy a bombázó nyaláb párhuzamos és kis keresztmetszetű legyen. Elektromos vagy mágneses lencsékkel a nyalábot formálni lehet. Pl. pontszerű forrásból eredő szét-



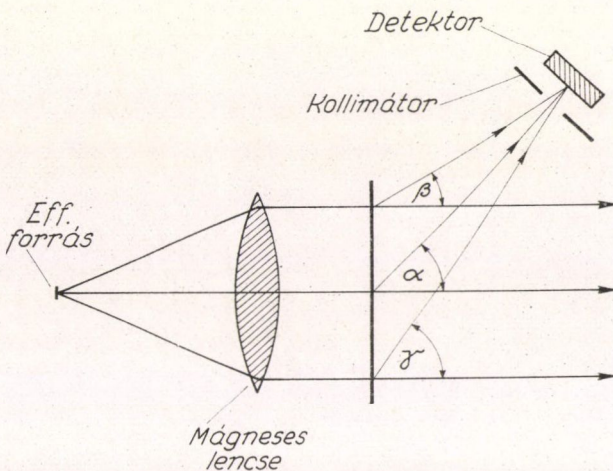
tartó nyalábot párhuzamos-sá lehet tenni, de a nyalábke-resztszemet megnövekedése a szögkorreláció elkenődésé-hez vezethet. L. 16. ábra.  $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ . A széles párhuzamos nyaláb keresztmetszetét kollimálással csökkenthetjük, de ez szükségszerűen intenzi-tásvesztéssel jár.

Fordítva: ha a forrás kiterjedt, de a nyaláb csak kevésbé széttartó, mágneses lencsével pontszerűvé tehet-jük (l. 17. ábra), de eközben a divergenciája erősen megnő, ami a szögkorrelációs függ-vényt szétkenheti.  $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ .

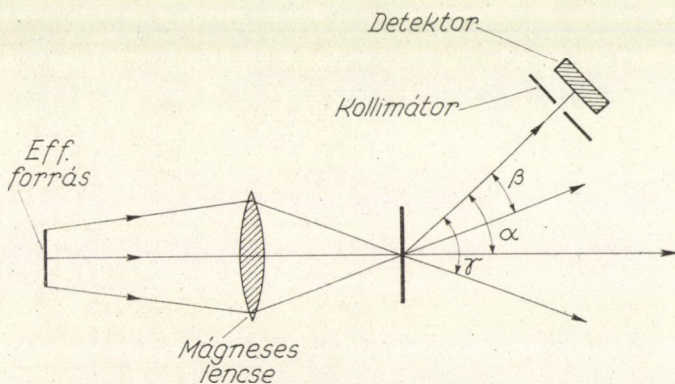
A felhozott példák alap-ján sejteni lehet, hogy a jó feloldású szögkorrelációs mé-rések csak akkor végezhetőek el, ha maga a gyorsító által szolgáltatott nyaláb kiváló minőségű, azaz kis keresztmetszetű, intenzív és paralel.

Hogy a nyaláb e sajátságait számszerűen is kifejezhessük és az említett sejtést igazoljuk, vezessünk be mindennek előtt néhány fogalmat.

A kihozott nyalábot úgy tekinthetjük, mintha egy „effektív forrásból” eredne, ami az eltérítő elektróda közelében van. A forrás véges kiterjedésű és különböző irányokban lépnek ki belőle részecskék (l. 18. ábra). Ezért a forrás sajátságait leg-jobbban a  $Z$ ,  $P_Z$ , ill.  $Y$ ,  $P_Y$  fázissíkokban lehet ábrázolni, ahol  $Z$ ,  $Y$  a forrás koordi-nátái, a  $P_Z$ ,  $P_Y$  a részecske impulzusok  $Z$ , ill.  $Y$  komponensei. A  $P_Z$  és  $P_Y$  kompo-

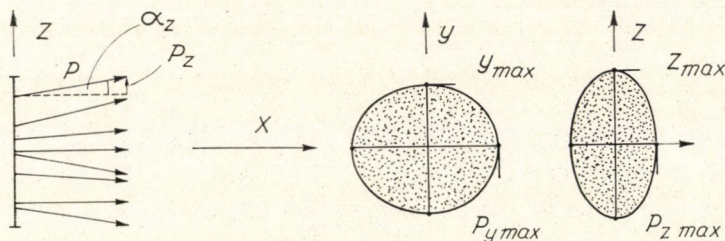


16. ábra. Jellemző kísérleti berendezés magreakció vizsgálathoz. A pontszerű forrásból kilépő széttartó nyalábot a lencse párhuzamossá teszi



17. ábra. Jellemző kísérleti berendezés magreakció vizsgálatokhoz. A nagy területű forrásból kilépő részecskéket a lencse egy pontba fókuszálja



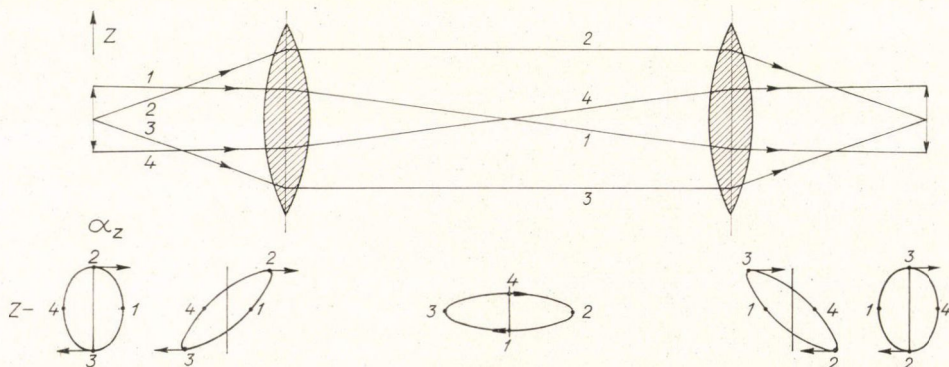


18. ábra. A részecskeforrás és a hozzá tartozó fázissíkok

nensek helyett szokták az  $\alpha_z$ , ill.  $\alpha_y$  szögeket is használni. Kis divergencia esetén  $\alpha_z \sim \frac{P_z}{P}$ ,  $\alpha_y \sim \frac{P_y}{P}$ . A határok rendszerint elmosódottak, de a könnyebb számíthatóság kedvéért tételezzük fel, hogy a  $Z, P_z$ , ill.  $Y, P_y$  fázisreprezentáció határai ellipszisek. Az ellipszisen belül bejelölt pontok a részecskéknak felelnek meg. A fázissík területegységére eső részecskék (pontok) számát „fázissík sűrűségnek” nevezzük.

A statisztikus mechanika *Liouville-tétele* szerint a fázistér sűrűség nem változik, ha a nyaláb elektromos vagy mágneses tereken halad át. Ha a részecskék mozgásegyenlete a koordináták szerint szeparálható, ami a gyorsítóknál használatos — általában szimmetria síkkal rendelkező — ionoptikai rendszerekben teljesül, a Liouville-tétel az egyes síkokban is érvényes, azaz a fázissík sűrűségek sem változnak. A részecskéket tartalmazó síkrész változtathatja alakját a fázissíkban, de a terület változatlan kell maradjon. Esetünkben tehát az  $A_z = \pi P_{z \max} Z_{\max}$  és  $A_y = \pi P_{y \max} Y_{\max}$  területek állandók a nyaláb mozgása során. Ezen invariáns mennyiségeket „nyaláb minőségnek” vagy „emittanciának” nevezzük, amit a  $Z$  és  $Y$  két merőleges irányban külön-külön be kell vezetni.

A kísérletek szempontjából gyakran kíváncsi, hogy minél több részecske legyen a fázissíkok ellipszisein belül. Ezért be szokták vezetni a „fényesség” fogalmát is, ami alatt az  $I/A_z \cdot A_y$  mennyiséget értik.  $I$  a nyalábintenzitás.

19. ábra. A részecskepályák egy elektromágneses optikai rendszerben és a megfelelő ( $Z, \alpha_z$ ) fázis-területek



Az elmondottak szemléletes megértése kedvéért kövessük végig a  $Z$ ,  $P_z$  fázisterület alakváltozásait, ha a nyaláb egy lencserendszeren halad át. L. 19. ábra. Látható, hogy  $Z$ ,  $P_z$  fázissíkban a nyaláb alakja változik, de a területe állandó.

A berkeleyi 224 cm pólusátmérőjű SFC 65 MeV-es nyalábjánál a radiális és vertikális nyalábminőség 50 mm·mrad, illetve 70 mm·mrad. Kb. 50  $\mu$ A nyalábintenzitás érhető el, így a forrás fényessége  $\sim 0,015 \mu\text{A}/\text{mm}^2 \cdot \text{mrad}^2$  [10]. Ez adatok kitűnő értékek, bármilyen más jelenleg ismert gyorsító adataival vetjük is össze őket.

### III. G. A szektorfókuszálási elv előnyei kis, nem relativisztikus ciklotronoknál

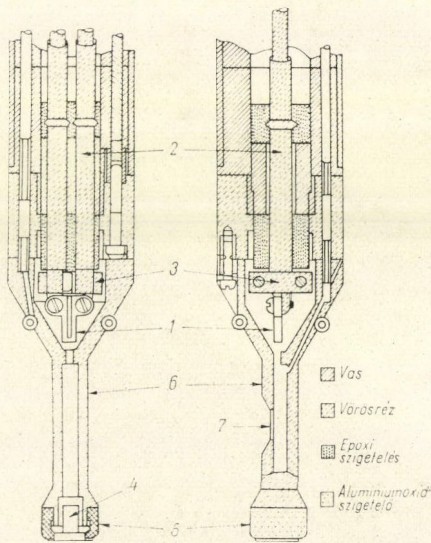
A szektor fókuszálási elv lehetővé teszi, hogy jóval kisebb légrést hagyjunk a mágnespólok között, mint a hagyományos ciklotronban, ami lényegesen csökkenti a mágnes és az üzemeltetés költségét. Így a relativisztikus energiákra kidolgozott szektor fókuszálási elv közvetlen alkalmazást nyer a kisenergiájú ciklotronok építésénél is [11].

### III. H. Az izokrón ciklotronokkal kapcsolatos néhány részletkérdés

A jelen tanulmány nem tekinti feladatának, hogy a SFC-ok elvi és gyakorlati problémáiról teljes összefoglaló képet adjon. Utalunk ezzel kapcsolatban J. Richardson [3], E. G. Komar [13], W. D. Allen [14], A. A. Kolomenszkij és A. N. Lebegyev [15], J. J. Livingood [16], M. S. Livingston és J. P. Blewett [17] stb. összefoglaló munkáira, valamint a SFC-ok problémáinak szentelt Los Angeles-i [18] és gatlinburgi [19] konferenciák gazdag anyagára. A gyorsító épületek tervezésével kapcsolatban A. N. Komarovszkij [20], a ciklotron konstrukció mérnöki problémáival kapcsolatban L. F. Kondrasev és N. N. Halgyn [21] könyvei hasznos információt nyújtanak. A következőkben röviden tárgyaljuk a SFC-ok néhány konstrukciós és üzemeltetési problémáját.

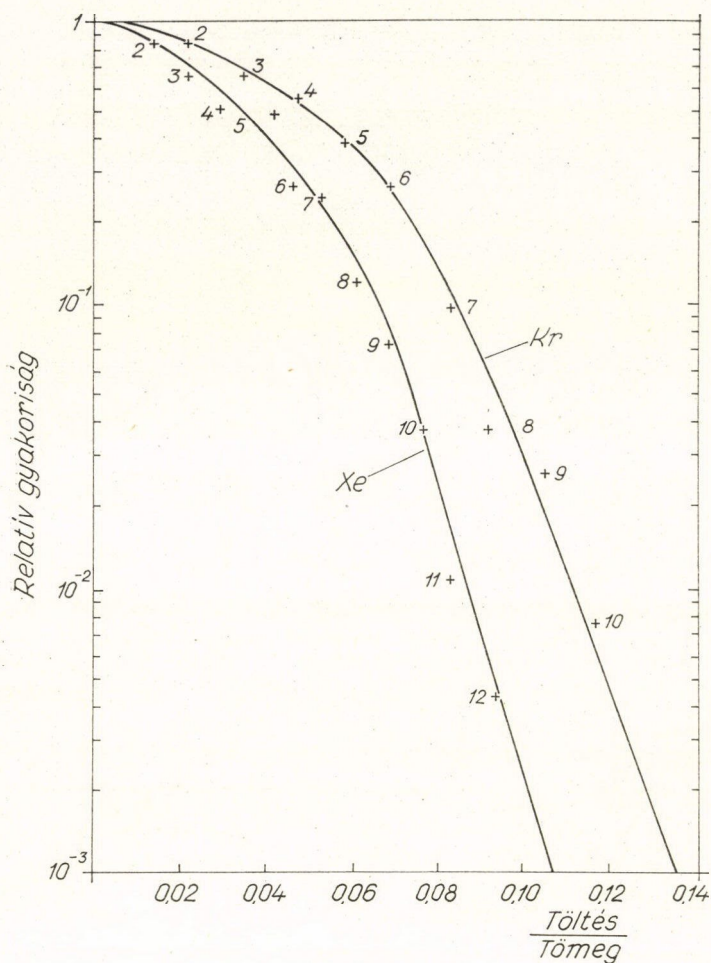
#### III. H. 1. Ionforrás, központi tartomány

A legtöbb SFC-ban Livingston-féle ionforrást [22] alkalmaznak. Az izzószálból kilépő elektronok az anód felé repülnek, de a ciklotron erős hosszirányú mágneses tere spirálpályára kényszeríti őket. Az ionforrás alján elhelyezett — rendszerint tantál — reflektorról az elektronok visszaverődnek. Mivel az elektronok nagy utat tesznek meg a gázban, nagy valószínűséggel ionizálnak. L. 20. ábra. Az ionforrásokat újabban nem oldalról, hanem felülről, a ciklotron vasmagon átfúrt nyíláson viszik



20. ábra. Egy ciklotron ionforrás metszeterajza. A számok jelentése: 1. Fűtőszál. 2. Fecskendő csövek. 3. Elektron pajzs. 4. Reflektor katód. 5. Szigetelő. 6. Anód. 7. Ion kimeneti nyílás. — K. W. Ehlers [38]





21. ábra. A berkeleyi lineáris nehéz ion gyorsító (HILAC) ionforrásának hozama többszörösen ionizált Xe és Kr ionokra [39]. Iváram: 1,5 A, ionáram:  $\text{Kr}^{+8}$ -ra 1 mA,  $\text{Xe}^{+4}$ -re 1 mA

be a centrumba. Így könnyebb a jusztirozásuk és a szervíznél a kezelők kisebb sugárveszélynek vannak kitéve.

Többszörösen ionizált ionok előállítására érdekében igen nagy teljesítményeket kell az ívkisülésbe táplálni. Szolgáljon ezzel kapcsolatban tájékoztatásul a 21. ábra, ami a többszörösen ionizált Xe és Kr ionok relatív gyakoriságát mutatja egy állandó ivárammal működő ionforrásban.

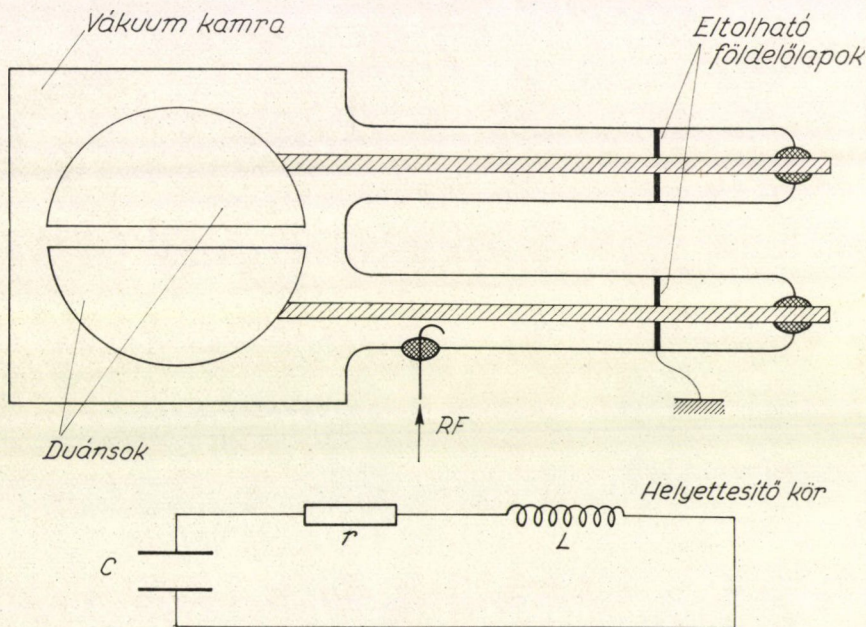
Az ionok kivonását a forrásból rendszerint a szemközti duánon levő feszültség végzi.



### III. H. 2. Rádiófrekvenciás (RF) rendszer

A 14. ábrán látható, hogy a ciklotron működéséhez  $1,5 \div 25$  MHz frekvenciájú (200  $\div$  12 m hullámhosszúságú) rádiófrekvenciás feszültségre van szükség. Kíváncos, hogy a feszültség amplitúdója minél nagyobb legyen, két okból is. Egyrészt a (8) formula mutatja, hogy a ciklotronnal elérhető maximális energia a feszültség növelésével nő, másrészt, ha ugyanolyan energiára kevesebb fordulattal gyorsul fel a nyaláb, kevesebb lesz az intenzitás veszteség a maradék gáz atomjain való szóródás stb. miatt. A feszültség bizonyos határon túl való növelésének azonban gyakorlati akadályai vannak: nehéz a bemeneti szigetelést megoldani, a duánsok között vákuumban elektronlavinák indulhatnak meg, a RF generátor ára a generátor feszültség-amplitúdójának kb. négyzetével arányos stb.

A fenti szempontok figyelembevételével a gyakorlatban a duánsokon néhány száz (maximálisan  $\sim 400$ ) kV feszültséget szoktak előállítani. A generátor feszültség-amplitúdója azonban elegendő, ha ennél 10–20-szor kisebb, mivel a duáns és veze-



22. ábra. A ciklotron rádiófrekvenciás rezonanciaköre

ték rendszert feszültségrezonanciára hangolva a duánsokon sokkal nagyobb feszültség is elérhető, mint a generátor feszültsége.

A rezonanciakört a gyakorlatban pl. a következőképpen lehet megvalósítani (l. 22. ábra). A RF-s teljesítményt egy hurkon át szokták beadni a rendszerbe anélkül, hogy ohmikus kontaktust hoznának létre. A rudak önindukciós együtthatóját



eltolható rövidrezáró (földelő) lapokkal lehet változtatni. Levezethető, hogy a duáns-lapok kapacitása a vákuumkamra felé:

$$C = \frac{1}{9 \cdot 10^{11}} \frac{\pi R^2}{4\pi\delta} \quad (\text{farad}),$$

ahol  $R$  a duáns sugara (cm),

$\delta$  a duáns és a kamratető közti távolság (cm).

A rezonanciarúd önindukciós együtthatója

$$L = 2l \left[ \ln \frac{r_0}{r_1} + 1 \right] \cdot 10^{-9} \quad (\text{henry}),$$

ahol  $l$  rúdhosszúság (cm),

$r_0$  a rezonanciarúd tartály belső sugara,

$r_1$  a rezonanciarúd sugara.

A rezgőkör eredő ellenállása ( $\bar{R}$ ):

$$|\bar{R}| = \left\{ r^2 + \left( L\omega - \frac{1}{C\omega} \right)^2 \right\}^{1/2}$$

ahol  $\omega$  a rezgés körfrekvenciája.

Feszültségrezonanciára való hangolás esetén

$$L\omega_r = \frac{1}{C\omega_r} \rightarrow f_r = \frac{1}{2\pi(LC)^{1/2}}.$$

A duánsokon levő feszültség ( $V_c$ ) a beadott feszültség ( $V$ ) értékénél többszörösen is nagyobb lehet.

$$\frac{V_c}{V} = \frac{-i}{r} \frac{1}{C\omega_r} = -i \frac{L\omega_r}{r}.$$

Az  $\frac{L\omega_r}{r} = Q$  mennyiséget a kör jósági tényezőjének nevezzük.

A tapasztalat szerint a ciklotron RF-s generátorának frekvenciája  $0,1 \div 0,01\%$ -en belül állandó kell legyen, mert egyébként intenzitás gyengülés, ill. végül teljes nyaláb-eltűnés következik be.

A duánsokat hűteni kell a benne folyó erős áramok miatt. A hűtést desztillált vízzel szokták végezni, amit a rúd mentén vezetnek a duánsokhoz és hosszú szigetelő csőkhígyón át a rúdhöz, hogy a vízoszlop ellenállása nagy legyen a föld felé.

### III. H. 3. A mágneses tér

A SFC-ok mágneses terének megfelelő kiképzése — tekintettel a szigorú követelményekre — általában nehéz feladat. Adott mágnesező áram mellett a mágneses térerősség eloszlásának kimérése egy síkban  $\approx 1000$  ponton való mérést igényel, kb.  $10^{-4}$ -es, nagy pontossággal. A kívánt mágneses téreloszlás kialakításához álta-



lában csak fokozatosan lehet közeledni a mérés és a megfelelő mágnespofa-korrekciók ciklus ismétlésével. Ezért szükség van a mérések automatizálására. Egy fél-automatikus mérőberendezés leírása megtalálható *E. G. Imajev* és munkatársai [23] dolgozatában. A mágneses térerősséget Hall-effektus segítségével mérték. Az InAs mérőfej hőmérsékletét  $\pm 0,2^\circ\text{C}$ -on belül stabilan tartották termosztátból áramoltatott víz segítségével. A Hall-feszültség értékeket egy berendezés 5 számjegy pontossággal számszerűen kijelezte, kinyomtatta és szalagra lyukasztotta „Minszk” számológép számára. A mérőfejet a ciklotron közepével koncentrikus pályán egy motor állandóan lassan mozgatta és egy berendezés biztosította, hogy megfelelő helyeken mérések történjenek. Így csak  $\sim 2,5$  sec volt szükséges egy ponton való méréshez.

### III. H. 4. *A belső nyaláb sajátosságai, a nyalábvesztés okai*

A belső nyaláb intenzitása a pálya mentén számos ok miatt csökkenhet. A következőkben felsorolunk ezek közül néhányat:

- a) Ütközés gázatomokkal. Ha a vákuum jobb, mint  $10^{-5}$  Hgmm,  $\cong 100\text{keV}$ /fordulat energianövekedésnél ez a veszteség már nem túl jelentős.
- b) Fáziskiesés az izokrón feltétel nem teljesülése miatt (a  $H_{\text{köz}}$  nem az előírás szerint növekszik a sugár mentén vagy a RF megengedett határon túl változik).
- c) A vertikális (axiális) oszcilláció erős megnövekedése.
- d) A horizontális (radiális) oszcilláció erős megnövekedése.
- e) Az egyensúlyi pálya eltolódása a horizontális síkban, amit pl. az okozhat, hogy a mágneses térerősség az egyik térfogathelyen erősebb, mint a másikon.
- f) Az egyensúlyi pályák erősen eltérnek a középsíktól, bizonyos sugaraknál a  $H$  eloszlása nem axiálszimmetrikus.
- g) Káros rezonanciák fellépése, pl. ha a radiális ( $f_r$ ) és vertikális ( $f_z$ ) rezgések, valamint a részecske keringési ( $f$ ) frekvenciái között a következő összefüggések állnak fenn:

$$\frac{f_r}{f} = 1, \quad \text{vagy}$$

$$\frac{f_z}{f} = \frac{1}{2}, \quad \text{vagy}$$

$$2f_z = f_r \quad \text{stb.}$$

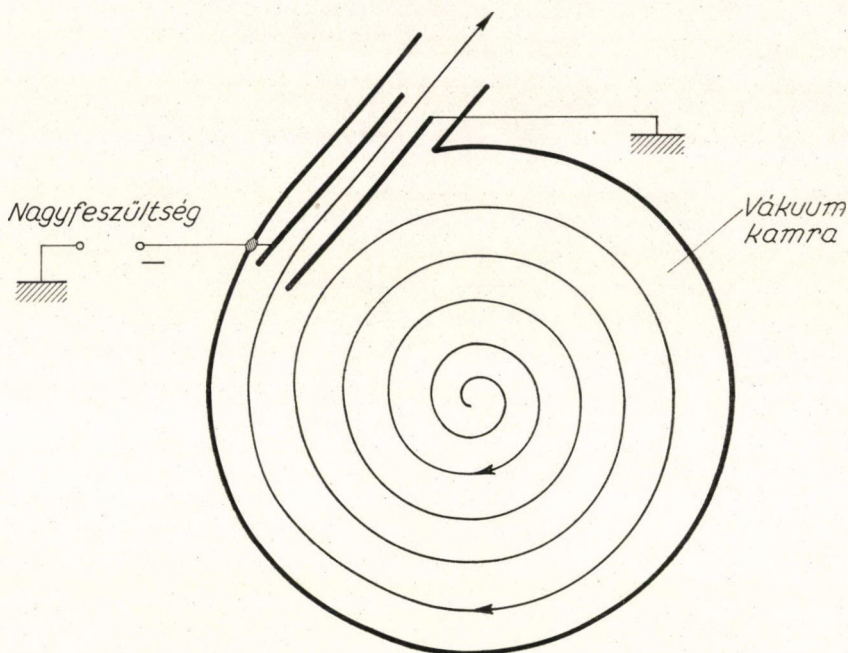
### III. H. 5. *A nyaláb kihozása a ciklotronból*

A nyaláb kihozásának többféle módja van. Ezek közül a leggyakrabban alkalmazott az elektrosztatikus kivonás (a), de a mágneses térerősség megváltoztatását (b) vagy a nehéz ion elektronhéjának lefosztását (c) is szokták használni.

a) Elektrosztatikus nyalábkivonás. A módszer elve a 23. ábra alapján könnyen megérthető. A végsugáron haladó nyaláb két elektróda közé jut. Ezek közül a belső földelt, míg a külsőre nagyfeszültséget kapcsolnak. Az elektromos erőter a pályát módosítja és elég nagy feszültség alakalmazása esetén a nyaláb kilép a gyorsító kamrából.

Az elektrosztatikus kivonásnál igen fontos, hogy mekkora a spirálpálya lépés-





23. ábra. A nyaláb kivonása ciklotronból elektrosztatikus módszerrel

köze ( $\Delta r$ ). Nem relativisztikus esetben a hagyományos ciklotronnál a (2) összefüggésből következik, hogy

$$r = \frac{(2E_0 E_{\text{kin}})^{1/2}}{300ZH}, \quad \text{ha } E_{\text{kin}} \ll E_0,$$

ahol

$$E_0 = m_0 c^2,$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{m_0 v^2}{2}.$$

( $E_0, E_{\text{kin}}$  eV-ban,  $H$  Oe-ben,  $r$  cm-ben.)

Az egységnyi kinetikus energia változásra eső sugárváltozás:

$$\frac{dr}{dE_{\text{kin}}} = \frac{E_0}{300ZH} (2E_0 E_{\text{kin}})^{-1/2}.$$

Amikor a részecske átmegy a duánsok között,  $ZeU$  energiára tesz szert, ha  $U$  a duánsok közötti feszültség. A teljes ciklusban nyert energia:  $2ZeU$ . Tehát a spirális lépésköze:

$$\Delta r = 2ZeU \frac{dr}{dE_{\text{kin}}} = \frac{2eUE_0}{300H} (2E_0 E_{\text{kin}})^{-1/2}. \quad (12)$$

[( $eU$ ) eV-ban.]



Látható, hogy a lépésköz a gyorsító feszültséggel arányosan növekszik, de csökken, ha a részecske energiája nő. Ha néhány mm lépésköz elérhető, mechanikailag megoldható a kihozás. A földelt lemez vastagsága elég, ha a fél mm-t eléri. Mivel a belső elektróda éle erősen aktiválódik, célszerű úgy kiképezni, hogy céltárgyakat lehessen erősíteni hozzá. E céltárgyakat különösen nagy felezési idejű izotópok előállítására szokták felhasználni, amikhez hosszú besugárzási idők szükségesek.

A kivonó feszültség számításánál kiindulhatunk abból, hogy milyen elektromos térerősség tudná teljesen kompenzálni a mágneses tér miatt fellépő centripetális erőt ( $P_H$ ).

$$P_H = 0,1 e Z H c \left( \frac{2E_{kin}}{E_0} \right)^{1/2}$$

$$P_E = 10^7 e Z E_d.$$

( $e$  coulomb-ban,  $E_d$  V/cm-ben,  $c = 3 \cdot 10^{10}$  cm sec<sup>-1</sup>,  $H$  Oe-ben,  $P$  erők CGS egyégeiben.) Ezeket egyenlővé téve és megoldva  $E_d$ -re

$$E_d = 300 H \left( \frac{2E_{kin}}{E_0} \right)^{1/2} \text{ [V/cm]}.$$

A gyakorlatban nem szükséges a teljes Lorentz-erőt kompenzálni, általában elég, ha egy tizedrészét kompenzáljuk. Már akkor is elérhető, hogy a részecske nagyobb sugár irányában elmozdul, ahol a mágneses térerősség már lényegesen kisebb és a nyaláb kihozhatóvá válik. Ennek ellenére 100 kV rendű eltérítő feszültségre szükség lehet.

Az eltérítő elektródákat úgy kell megszerkeszteni, hogy a vákuum lerontása nélkül lehessen helyüket változtatni. Ez szükséges a maximális nyalábintenzitás elérése érdekében.

Az elektrosztatikus kihozás elvi egyszerűsége mellett bizonyos hátrányokkal is jár.

— A kihozási határfok elég kicsi ( $\approx 30\%$ ), a nyaláb többi része az elektródákat aktiválja.

— A kivonáshoz nagyfeszültség szükséges.

— A nyalábkihozást gyakran csak a végsugárról lehet biztosítani. Ha adott sugárról különböző energiájú részecskéket akarunk kihozni, változtatni kell a mágneses térerősséget és a gyorsító feszültség frekvenciáját, sőt gyakran a mágneses tér térbeli eloszlását is.

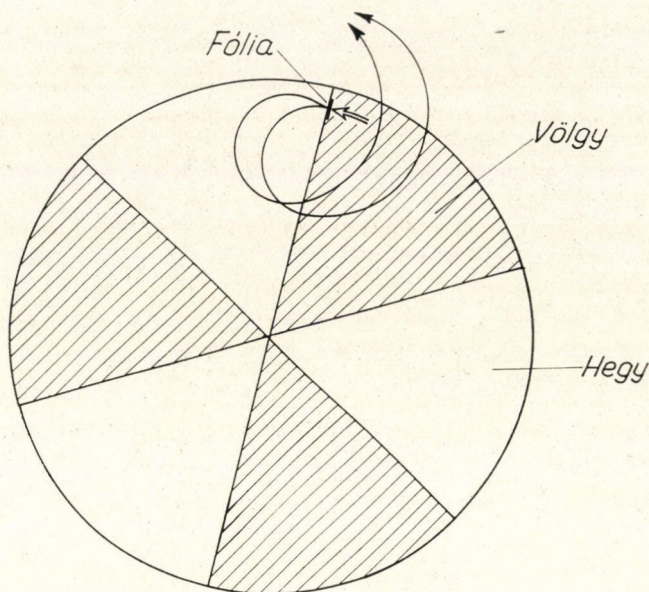
b) Nyalábkivonás a mágneses térerősség lecsökkentésével. Ha a végsugár adott helyén a mágneses térerősséget pl. mágneses rövidzárral megszüntetjük vagy legalábbis erősen csökkentjük, a nyaláb közel érintőlegesen kirepül a gyorsítóból. Ilyen nyalábkihozást alkalmaznak pl. a dubnai szinkrociklotronban.

c) Nyalábkihozás a nehéz ionok lekopasztásával. A kihozás elvét a 24. ábra szemlélteti. A felgyorsított ionokat a kívánt sugárnál egy fólián vezetik át, ami az ionok sebességétől függően részben vagy egészben lefosztja az elektronokat az atomhéjakról. A módszer leírása megtalálható pl. *G. N. Vjalov, Ju. C. Oganyeszjan és G. N. Flerov* [24] munkájában. A módszer előnyei a következők:

— Nincs szükség kivonó nagyfeszültségre.

— Igen nagy kihozási határfok érhető el.





24. ábra. Nehéz ionok kivonása SFC-ből elektron lefosztásos módszerrel

— Egy bizonyos energián túl tetszőleges energiával kihozhatók a részecskék egyszerűen úgy, hogy az elektron lefosztást végző fóliát különböző pályasugarakra állítjuk.

### III. H. 6. Vákuum

A ciklotronok vákuumkamrájában általában  $\leq 10^{-5}$  Hgmm nyomást kell biztosítani. Különösen fontos a jó vákuum többszörösen ionizált nehéz ionok gyorsításánál, mivel az ionok könnyen áttöltődnek és így kiesnek a rezonancia gyorsításából.

A ciklotronok vákuum problémáit részletesen tárgyalják pl. a [21] és [25] munkák.

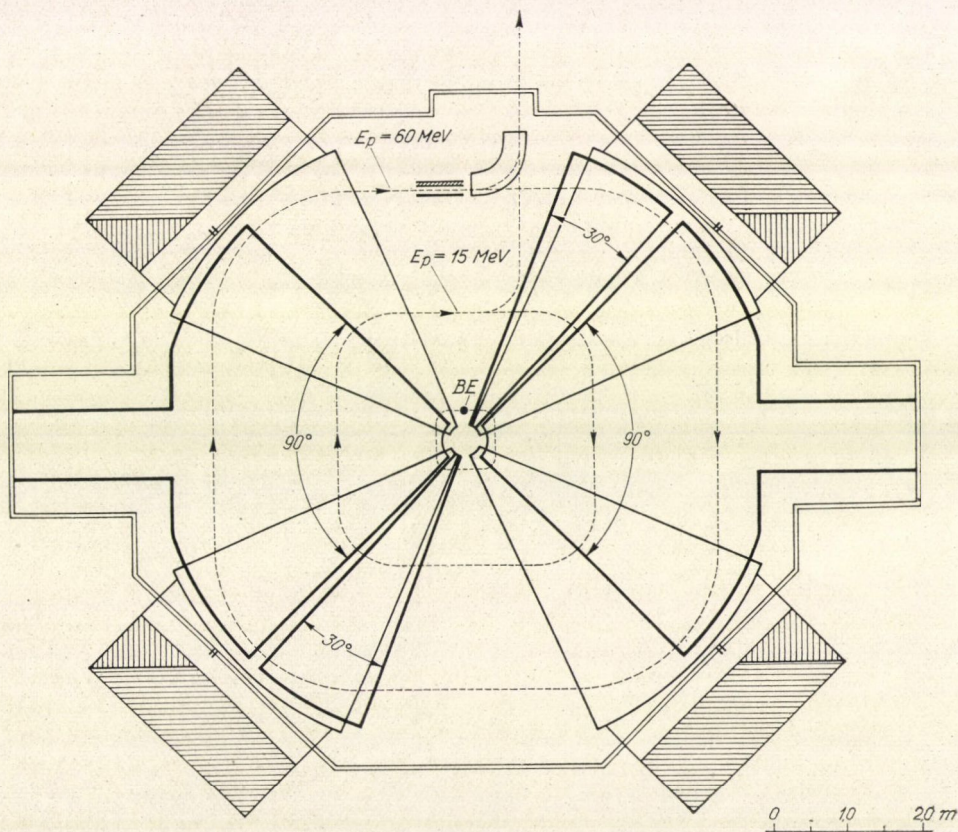
### III. I. Monoenergetikus izokrón ciklotronok

A magfizika sürgető igényének hatására az utóbbi időben világviszonylatban intenzív munka folyik „monoenergetikus” ciklotronok kifejlesztésére. Az eddig ismertett ciklotronok nyalábenergia szórása nagy, néhány 0,1%, vagy % rendű (l. III. E. fejezet). Mágneses manokromátokkal az energiaszórás csökkenthető, de így kb.  $40 \div 100$ -szoros nyaláb intenzitás gyengülés lép fel, ha azt akarjuk, hogy a nyaláb energiaszórása csak 0,01% rendű legyen. Természetes az a törekvés, hogy magából a gyorsítóból homogén energiájú nyalábot igyekeznek előállítani.

Monoenergetikus nyaláb nyerhető a ciklotronból, ha biztosítjuk, hogy *a)* minden ion ugyanolyan fordulatszámot tegyen meg a gyorsítás folyamán és *b)* az egyes fordulatonál az ionok energianövekedése egyenlő legyen.

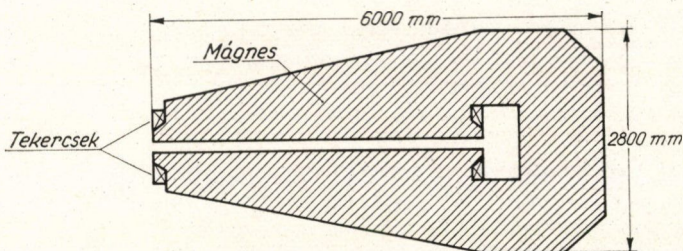


Az *a)* követelmény teljesítése érdekében fontos, hogy a különböző fordulat-számokat megtett ionok jól elváljanak egymástól, azaz nagy legyen a spirálpályák lépésköze és kicsi legyen a nyaláb radiális rezgéseinek amplitúdója. A (12) kifejezés mutatja, hogy nagy spirális lépésköz érdekében célszerű a mágneses térerősséget kicsinek választani. A (3) kifejezés szerint azonban nagy energiájú nyaláb csak úgy nyerhető kis  $H$  érték mellett, ha az  $r$  pályasugár nagy. Innen következik a fenti elven működő monoenergetikus ciklotronok jellegzetessége: kis  $H$  és nagy  $r$  értékek. Pl. a dubnai monoenergetikus ciklotron tervben (l. [42]) a mágneses térerősség középértéke a központi tartományban  $\bar{H}_0 = 2669$  Oe, a végpálya átlagsugara  $\bar{r}_v = 400$  cm. Ennél a sugárnál  $E_p = 60$  MeV energiájú,  $\Delta E_p/E_p^{-1} \sim 10^{-4}$  homogenitású proton nyaláb nyerhető. A spirálpálya lépésköze fél cm rendű érték, ha a protonok energianövekedése 100 keV/fordulat. Annak érdekében, hogy a nyaláb radiális rezgéseinek amplitúdója kisebb legyen a spirálpálya lépésközénél, célszerű kívülről löni be a ciklotronba a felgyorsítandó ionokat. A bevitt ionnyaláb emittenciája és intenzitása eleget kell hogy tegyen a követelményeknek. Megfelelő nyalábot szolgáltathat pl. egy 600 kV-os kaszkád generátor vagy egy 1 MV-os transzformátoros gyorsító (l. [42]).



25. ábra. A tervezett dubnai monoenergetikus ciklotron sémája





26. ábra. A tervezett dubnai monoenergetikus ciklotron szektor elektromágnesének metszetrajza

A *b*) követelmény teljesítése érdekében biztosítani kell, hogy abban a fázistartományban, ahol a részecskék gyorsulnak, a gyorsító feszültség állandó legyen. A dubnai tervek szerint  $\pm 10^\circ$  fázistartományban  $10^{-4}$ -es gyorsító feszültség stabilitás érhető el, ha a segédduánsra a gyorsító feszültség 3-ik harmonikusát adják megfelelő amplitúdóval.

Ha a nyaláb egy teljes körülforduláskor 100 keV energianövekedésre tesz szert és az egyes pályák jól elkülönülnek egymástól, a szektorterű ciklotronból 100 keV-es lépésközzel kihozható a gyorsított nyaláb. A kihozás technikailag pl. úgy oldható meg, hogy a minimális mágneses tér tartományában egy elektrosztatikusan  $\sim 90^\circ$ -os nyalábeltérítést biztosító elektródapárt mozgatunk lépésenként a gyorsítószugár mentén.

A nagy nyalábáramok megkövetelik, hogy a flutter függvény nagy legyen. A [42] tervben 100  $\mu$ A kihozott nyalábáramra számítanak és a flutter függvény értékét  $F = 0,67 \div 0,9$  intervallumban szabják meg.

A tervezett dubnai monoenergetikus ciklotron metszetrajza a 25. ábrán látható. A mágnespofa metszetrajzot külön feltüntettük a 26. ábrán.

A tervek egyik érdekessége, hogy a gyorsító vezérlését több vonatkozásban is elektronikus számológép közvetlen felhasználásával végzik.

A gyorsító első variánsának legfontosabb adatai a IV. táblázatban vannak összegezve. A táblázatból látható, hogy a tervezett monoenergetikus ciklotron 60 MeV maximális energiájú, 100  $\mu$ A intenzitású proton nyalábot szolgáltat  $10^{-4}$ -es energiahomogenitás mellett.

A monoenergetikus ciklotron által szolgáltatott nyaláb energiahomogenitása mágneses monokromátor alkalmazásával természetesen tovább javítható. Remény van arra, hogy a (monoenergetikus ciklotron + monokromátor) rendszerrel 60 MeV-es *p* nyaláb nyerhető  $\Delta E \approx 3$  keV energiefeloldással 20  $\mu$ A áram mellett.

Az utóbbi években a tandem generátorok is lényegesen fejlődtek, különösen az amerikai „High Voltage Engineering Co.” fejlesztőmunkája során. A legnagyobb „Imperátor” típusú tandem generátorok kombinációjával a következő években várható, hogy sikerül 36 MeV-es proton nyalábot előállítani (Brookhaven Nat. Lab.). A High Voltage Engineering Co. katalógusa szerint az ilyen nagy energiáknál várható proton nyaláb intenzitása  $\sim 0,5 \mu$ A. Egy 10 MV-os feszültségegység stabilitása kb.  $\pm 1$  kV.

A gyorsítóadatok összehasonlításából látható, hogy a monoenergetikus ciklotronok mind nyaláb energiában, mind intenzitásban lényegesen felülmúlhatják a tandem generátorokat, és energiastabilitásban is versenyképesek velük.



#### IV. Az izokrón ciklotronok alkalmazási területei

##### IV. A. Izotóptermelés

##### IV. A. 1. Különböző izotóptermelő berendezések hozamintenzitásának összehasonlítása

A különböző izotóptermelő berendezések hatékonyságának összehasonlítása céljából célszerű bevezetni a jellemző hozamintenzitás (JH) mennyiséget:

$$JH = \int_0^d I(x) \sigma(x) \varrho \, dx,$$

ahol  $J(x)$  a bombázó részecskék intenzitása,  
 $\sigma(x)$  a reakció hatáskeresztmetszete egy adott izotóp előállítása szempontjából,  
 $\varrho$  a céltárgy sűrűsége,  
 $x$  a frontfelülettől számított távolság a céltárgyban,  
 $d$  az egy millimól/cm<sup>2</sup>-nek megfelelő céltárgyvastagság.

Rudstam [26] munkájában kiszámította az izokrón ciklotronok, szinkrociklotronok, nehéz ion gyorsítók, reaktorok és neutron generátorok jellemző hozamintenzitás értékeit. Pl. izokrón ciklotronoknál feltételezte, hogy a bombázó nyaláb < 50 MeV energiájú, 100  $\mu$ A intenzitású protonból áll és ezek  $(p, xn)$  reakcióval termelnek neutron hiányos izotópokat. Szinkrociklotronok esetében 600 MeV energiájú, 1  $\mu$ A intenzitású bombázó proton nyalábbal számolt, amely  $(p, 2pxn)$  spallációs reakcióval hoz létre izotópokat stb.

A számítások eredménye szerint nem túl erősen neutron hiányos izotópok termelése szempontjából (maximálisan  $\sim 10$  neutron hiány a stabilitási görbén fekvő izotóphoz képest) az izokrón ciklotronok adják a legnagyobb jellemző hozamintenzitást minden céltárgy—rendszer tartományban. Az izokrón ciklotronok kiváló izotóptermelő-képessége jórészt a bombázó nyaláb nagy intenzitásának köszönhető.

Az izokrón ciklotronokkal termelt izotópok zömmel  $\beta^+$  kibocsátással, ill. elektron befogással bomlanak. Az elektron befogást Röntgen-sugárzás, ill. Auger-elektron emisszió követi. A < 50 MeV-es protonokkal előállítható izotópok felezési ideje általában sec-nál nagyobb.

A nehéz ion reakciókkal távoli transzuránok is előállíthatók.

A ciklotronok a szolgáltatott nagy nyalábintenzitás miatt kezdettől fogva igen alkalmas berendezések voltak izotóptermelésre. Ez még csak fokozódott azáltal, hogy a korszerű SFC-okban mind a bombázó részecskék típusát, mind a kihozott nyaláb energiáját viszonylag egyszerűen és gyorsan lehet változtatni. Adott izotópok termelése szempontjából ezek a sajátságok igen fontosak, mert könnyen be lehet állítani a maximális hozamhoz szükséges besugárzási paramétereket.

##### IV. A. 2. A termelt izotópok felhasználása magspektroszkópiai alap kutatásra

A SFC-okkal előállított izotópok lehetővé teszik sokoldalú magspektroszkópiai alap kutatás végzését. Néhány fontosabb témakör:

- Új bomlástípusok vizsgálata (pl. a  $p$  radioaktivitás különböző fajtái),
- A félempirikus atommag-tömeg formula továbbfejlesztése.



- $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  stb. bomlásra vonatkozó ismereteink bővítése.
- Atommag-szerkezet kutatások, magmodellek, bomlásséma vizsgálatok.
- A természet alapvető kölcsönhatásainak vizsgálata magspektroszkópiai módszerekkel stb.

Lehetőség nyílhat néhány új izotóp előállítására és vizsgálatára is. L. ezzel kapcsolatban a [28] részletes összefoglaló dolgozatot.

#### IV. A. 3. *A SFC-okkal termelt izotópok felhasználása gyógyászati, biológiai, kémiai, műszaki kutatási és ipari célokra*

Egész sor olyan izotóp van, amelyet a gyakorlatban használnak, de reaktorokban nem állíthatnak elő. A reaktorok neutron többletes izotópokat szolgáltatnak, akár ( $n$ ,  $\gamma$ ), akár ( $n$ , hasadás) reakcióval állnak is elő a termékek. Ugyanakkor bizonyos elemeknek csak a neutron hiányos oldalon vannak a gyakorlati felhasználás szempontjából megfelelő felezési idejű izotópjai. Ilyenek pl.  $^7\text{Be}$ ,  $^{13}\text{N}$ ,  $^{15}\text{O}$ ,  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{48}\text{V}$  stb.

A ciklotronokban termelt izotópok előnye, hogy nagy specifikus aktivitással állíthatók elő. Ennek az az oka, hogy a töltött részecske reakciók termékeinek rendszáma általában különbözik a céltárgy rendszámától és így kémiai elválasztással az aktivitás erősen koncentrálható.

A gyógyászatban és biológiai kísérletekben diagnosztikai célokra szívesen alkalmaznak rövid felezési idejű nyomjelző anyagokat, mert ezekből viszonylag nagy aktivitások is bevezethetők a szervezetbe anélkül, hogy lényeges károsodás lépne fel. Különösen a pajzsmirigyfunkció, véráram és daganatok helyének meghatározására használnak szívesen radioaktív indikátorokat. Igen fontos pl. a  $^{11}\text{C}$  ( $T_{1/2} = 20,5 \text{ min}$ ) alkalmazása, ami  $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$  reakcióval állítható elő. (A reaktorban termelt  $^{14}\text{C}$  izotóp 5730 év felezési idejű.)

A rákterápiában elterjedten használják a  $^{63}\text{Zn}$ -et. Kolloid  $\text{ZnS}$  injekció alakban beadható a szervezetbe, amit a rákos szövet szelektíve felvesz magába. Különösen hasznos az eljárás, ha a daganat nehezen megközelíthető helyen van.

Sok esetben sikeresen felhasználhatók a  $\beta^+$  emittáló izotópok pontos helymeghatározásra. A pozitron megsemmisülését követő 0,511 MeV-es  $\gamma$  fotonokat koincideneciában detektálva, megállapítható, hogy a szervezet melyik pontjáról jött a sugárzás. A daganatok lokalizálására sikerrel használhatók az  $^{74}\text{As}$  és  $^{68}\text{Ga}$  pozitron sugárzók, mivel szelektíve kötődnek meg a daganatban.

Az  $^{18}\text{O}(\alpha, pn)^{18}\text{F}$  reakcióval előállított  $^{18}\text{F}$ -el eredményesen vizsgálható a fluor felvétele a fogakba és csontokba.

A 8,2 óra felezési idejű neutron hiányos  $^{52}\text{Fe}$  izotóp lehetővé teszi a hemoglobin elhelyezkedésének vizsgálatát a csontvelőben. E kísérletekhez az aktív vas izotópot beépítik a hemoglobinba.

Tekintettel a ciklotronok termelte izotópok fontosságára, világszerte több kórházat felszereltek ciklotronokkal. Pl. a londoni Hammersmith kórházban egy 16 MeV-es deuteron nyalábot (és más részecskéket is) szolgáltató ciklotron működik. Az I. táblázat felsorolja azokat az izotópokat, amiket az említett kórházban előállítanak és felhasználnak [29].

A felsoroltakon kívül külön rendelésre előállítanak  $^{110\text{m}}\text{Ag}$ ,  $^{72}\text{As}$ ,  $^{74}\text{As}$ ,  $^7\text{Be}$ ,  $^{206}\text{Bi}$ ,  $^{139}\text{Ce}$ ,  $^{109}\text{Cd}$ ,  $^{83}\text{Rb}$ ,  $^{84}\text{Rb}$ ,  $^{72}\text{Se}$ ,  $^{75}\text{Se}$ ,  $^{85}\text{Sr}$ ,  $^{48}\text{V}$ ,  $^{65}\text{Zn}$  izotópokat is.



## I. TÁBLÁZAT

A londoni Hammersmith kórházban ciklotronnal előállított és felhasznált izotópok [29]

Aktív anyag	Felezési idő	Bomlásmód és a kibocsátott fotonok energiája	Előállítás	Orvosi alkalmazás, megjegyzés
$C^{15}O_2$	2,0 m	$\beta^+$	$^{14}N(d, n)^{15}O$	Szívönt kimutatás, a regionális tüdő véráram mérése
$^{13}N_2$	10,0 m	$\beta^+$	$^{12}C(d, n)^{13}N$	Regionális tüdőventilláció és véráram
$^{11}CO_2$	20,5 m	$\beta^+$	$^{10}B(d, n)^{11}C$	$CO_2$ poolok és ventilláció irányítása
$^{11}CO$	20,5 m	$\beta^+$	$^{10}B(d, n)^{11}C$	Vértérfogat
$^{18}F$	1,83 h	$\beta^+$	$^{11}B(d, 2n)^{11}C$	Csontlaesiók kimutatása
$^{87m}Sr$	2,9 h	$\gamma(0,388 \text{ MeV})$	$^{16}O(\alpha, pn)^{18}F$	" "
$KB^{18}F_4$	1,83 h	$\beta^+$	$^{87}Y$ -ből lefejeve	" "
$^{90}Nb$	14,6 h	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,14 - 2,3 \text{ MeV})$	$^{16}O(\alpha, pn)^{18}F$	Agyszczintigráfia
$^{129}Cs$	32,4 h	$\epsilon, \gamma(0,385 \text{ MeV})$	$^{90}Zn(d, 2n)^{90}Nb$	Tumordetektálás
$^{130}Cs$	29,1 m	$\epsilon, \beta^+$	$^{127}J(\alpha, 2n)^{129}Cs$	Coronaria áramlás Szívszcintigráfia
$^{81}Rb$	4,7 h	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,45; 1,1 \text{ MeV})$	$^{127}J(\alpha, n)^{130}Cs$	
$^{82m}Rb$	6,3 h	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,55; 0,78 \text{ MeV})$	$^{79}Br(\alpha, 2n)^{81}Rb$	
$^{43}K$	22 h	$\beta^-, \gamma(0,63; 0,37 \text{ MeV})$	$^{79}Br(\alpha, n)^{82}Rb$	
$^{123}J$	13 h	$\epsilon, \gamma(0,16 \text{ MeV})$	$^{121}Sb(\alpha, 2n)^{123}J$	Pajzsmirigy szcintigráfia
$^{51}Cr$	27,8 d	$\epsilon, \gamma(0,32 \text{ MeV})$	$^{51}V(d, 2n)^{51}Cr$	Igen nagy fajlagos akt., limfoid sejt jelzése
$^{64}Cu$	12,8 h	$\epsilon, \beta^+, \beta^-, \gamma(1,34 \text{ MeV})$	$^{66}Zn(d, \alpha)^{64}Cu$	Nagy fajlagos akt.
$^{68}Ga$	68 m	$\epsilon, \beta^+$	$^{68}Ge$ -ből lefejeve	A $^{68}Ga$ anyaeleme
$^{68}Ge$	275 d	$\epsilon$	$^{66}Zn(\alpha, 2n)^{68}Ge$	
$^{124}J$	4,2 d	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,60 - 2,26 \text{ MeV})$	$^{121}Sb(\alpha, n)^{124}J$	
			$^{123}Sb(\alpha, 3n)^{124}J$	
$^{125}J$	57 d	$\epsilon, \gamma(0,035 \text{ MeV})$	$^{123}Sb(\alpha, 2n)^{125}J$	Nemesgázoldat, vér-árammérés
$^{79}Kr$	33 h	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,26 \text{ MeV stb.})$	$^{79}Br(d, 2n)^{79}K$	
$^{81m}Kr$	13 s	$\gamma(0,9 \text{ MeV})$	$^{81}Rb$ -ből lefejeve	
$^{52}Mn$	5,6 d	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,73 \text{ MeV})$	$^{52}Cr(d, 2n)^{52}Mn$	Fe felvétel szervekben, csontvelő szcintigráfia
$^{54}Mn$	291 d	$\epsilon, \gamma(0,84 \text{ MeV})$	$^{56}Fe(d, \alpha)^{54}Mn$	
$^{52}Fe$	8 h	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,16 \text{ MeV})$	$^{50}Cr(\alpha, 2n)^{52}Fe$	
$^{87}Y$	80 h	$\epsilon, \beta^+, \gamma(0,48 \text{ MeV})$	$^{85}Rb(\alpha, 2n)^{87}Y$	A $^{87m}Sr$ anyaeleme

$\epsilon$  elektron befogás  
 $\beta^+$  pozitron } kibocsátás  
 $\beta^-$  elektron }  
 $\gamma$  gamma foton kibocsátás

## IV. B. Atommag-reakciók vizsgálata

## IV. B. 1. A magreakció vizsgálatok energiaigénye

A SFC-ok által szolgáltatott töltött részecske nyalábok kiváló lehetőséget adnak az atommag-reakciók vizsgálatára. Ezt megítélhetjük a II. táblázat alapján, ami áttekintést ad a különböző bombázó és céltárgy atommagok között fellépő Coulomb-fal magasságáról.



## II. TÁBLÁZAT

A Coulomb-fal magassága MeV-okban könnyű és nehéz ionokkal létrehozott magreakcióknál. Az adatokat  $p$  és  $\alpha$  bombázó részecskék esetén a [12] táblázatos munkából vettük,  $^{12}\text{C}$  és nehezebb részecskék esetén pedig a

$$\frac{0,96 Z_1 Z_2}{A_1^{1/3} + A_2^{1/3}}$$

kifejezésből számoltuk.

Bombázó részecske ( $Z_1, A_1$ )	Céltárgy atommag ( $Z_2, A_2$ )		
	$^{20}_{10}\text{Ne}$	$^{118}_{50}\text{Sn}$	$^{232}_{90}\text{Th}$
$p$	2,6	8,8	$\approx 13$
$\alpha$	4,5	16	$\approx 24$
$^{12}_6\text{C}$	11,5	40,0	61,5
$^{22}_{10}\text{Ne}$	17,4	62,2	96,6
$^{40}_{18}\text{Ar}$	28,2	103,6	162

jú azonosítását és energiamérését lehetővé tevő  $E - dE/dx$  detektor teleszkópok. A félvezető detektorok megjelenése óta a teleszkópok jelentősége nőtt, mivel — több más előnyös sajátosságuk mellett — igen jó energia feloldást lehet velük elérni. E módszer azonban csak akkor válik be igazán, ha a részecskék energiája nagy. Pl. t-ok megfelelő azonosításához kívánatos, hogy energiájuk  $\approx 15$  MeV legyen. A SFC-ok által szolgáltatott nagy energiák ebből a szempontból is hasznosak.

#### IV. B. 2. Az izokrón ciklotronokkal különösen előnyösen vizsgálható magreakció típusok

A SFC-ok által szolgáltatott nyalábok igen alkalmasak a következő jelenség-csoportok vizsgálatára:

##### a) Direkt magreakciók.

A gyorsított nyalábok nagy energiája és monoenergetikus volta, a detektáló rendszerek fényerejének és feloldóképességének növekedése továbbá a számítástechnikai és elméleti módszerek tökéletesedése oda vezettek, hogy a magszerkezetről a direkt reakciókkal értékes és megbízható információt lehet nyerni. Olyan egyszerű folyamatok, mint a rugalmatlan szóródás, egy és két részecske leszakadás vagy felvétel — mivel a folyamat reakció mechanizmussal kapcsolatos része elméletileg elég jól leírható — a magszerkezetre, a gerjesztett nívók sajátosságaira eléggé egyértelmű eredményeket szolgáltat. Minél nagyobb a bombázó részecske energiája, annál egyértelműbben lehet a direkt folyamatokat elválasztani más reakció mechanizmusoktól. Nehéz céltárgymagokon létrehozott direkt reakciók vizsgálatához különösen fontos, hogy a bombázó nyaláb monoenergetikus és nagy energiájú legyen. Itt ugyanis a Coulomb-fal magas, a magreakció  $Q$  értéke néha erősen negatív és a gerjesztési nívók egymástól való átlagos távolsága gyakran kicsi.

Az elmúlt évtizedek során a stabilis magok közelében fekvő izotópok szerkezetéről a  $\beta$  és  $\gamma$  spektroszkópiai kutatások sok értékes információt szolgáltatottak. E vizsgálati módszerek teljesítőképessége azonban korlátozott: egyrészt mert a  $\beta$  bomlás után az atommagoknak csak bizonyos, általában alacsonyan fekvő nívói gerjesztőd-

Az a tény, hogy a SFC-ok nagy intenzitású nyalábot szolgáltatnak relativisztikus energia tartományban is, számos új vizsgálatra ad lehetőséget. A magfizikai kutatás fejlődése során igen sok vizsgálatot végeztek  $\approx 10$  MeV és  $\approx 100$  MeV proton energia tartományban elektrosztatikus gyorsítókkal, ciklotronokkal, sinkrociklotronokkal stb., míg a  $10 \div 100$  MeV tartományban — keveset. A „rés” betöltésére a SFC-ok lehetőséget adnak.

A magreakciók vizsgálatában lényeges szerepet játszanak a reakciótermékek egyide-



nek, másrészt mert a megjelent igen nagy számú kísérleti magspektroszkópai munka után egyre nehezebbé válik ilyen módszerekkel új információt szerezni. Vannak atommagok, amiknek nívósémáját több mint félszáz munkában vizsgálták már, döntő többségében magspektroszkópai módszerekkel ( $^{166}\text{Er}$ ,  $^{182}\text{W}$  stb.).

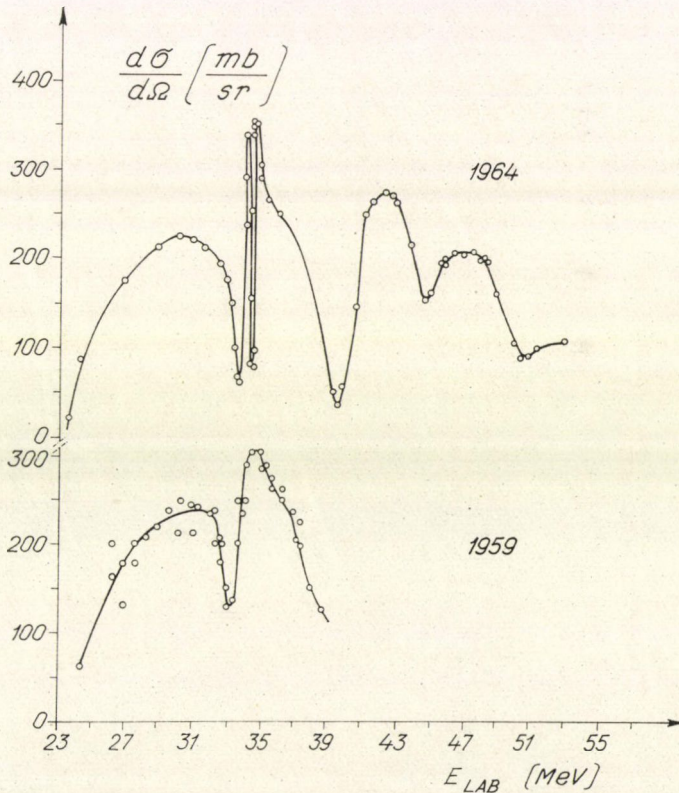
Nagy energiájú monoenergetikus nyalábokkal létrehozott magreakciókkal az atommagoknak sok új nívója válik hozzáférhetővé a kísérleti vizsgálatok számára.

b) Új, nagy küszöbenergiájú reakciók megfigyelése.

A SFC nyalábok nagy energiája és energiahomogenitása lehetővé teszi, hogy új vagy kevésbé vizsgált reakciókat is tanulmányozni lehessen. Pl. a  $^{12}\text{C}/^3\text{He}$ ,  $^6\text{He}/^9\text{C}$  reakció küszöbenergiája  $\sim 40$  MeV és a reakció hatáskeresztmetszet még 65 MeV bombázó energiánál is (ahol lényegesen nagyobb, mint a küszöbenergiánál) csak  $1 \mu\text{b}/\text{sr}$  [5]. Sok más gyorsítóval ellentétben a SFC-ok elő tudják állítani a kívánt energiájú, intenzitású és energiahomogenitású  $^3\text{He}$  nyalábot.

c) A reakció hatáskeresztmetszetek energiafüggése.

Az utóbbi években a reakció hatáskeresztmetszetek energiafüggésének vizs-



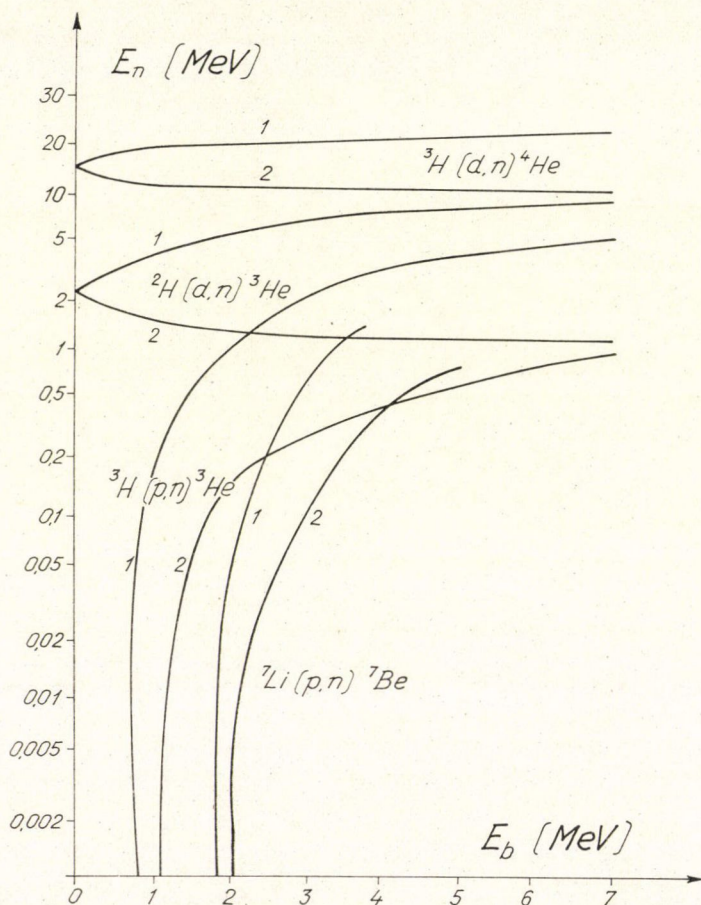
27. ábra. Az  $\alpha$ - $\alpha$  ütközés gerjesztési függvényei tömegközépponti rendszerben  $90^\circ$ -nál. A felső görbe a [40] az alsó a [41] közleményből származik. Látható, hogy a SFC-al végzett újabb mérés éles finomszerkezeti vonal felismerését tette lehetővé [10]



gálata a magfizika korszerű kutatási módszerévé vált. A hatáskeresztmetszet fluktuáció vizsgálatok az ütközésmechanizmus szempontjából értékes információt hoztak. Erősen fejlődött a közbenső és a magerők töltésfüggetlenségén alapuló analóg rezonanciák vizsgálata is, bár még ezek a fejlődés kezdeti szakaszán állnak és sok újat lehet tőlük várni.

A 27. ábra egy gerjesztési függvényt mutat, amit SFC segítségével vettek fel, amikor He ionok He magokon való szóródását vizsgálták.

A 34 MeV körül észlelhető éles rezonancia szerkezetet a  $^8\text{Be}$  16,6 és 16,9 MeV gerjesztési nívójának felel meg. Itt a méréseket 40 keV lépésközzel végezték. Ilyen éles rezonanciák csak jó energiahomogenitású nyalábbal nyerhetők. Egy korábbi mérésben, amikor a nyaláb energiáját még fékező fóliákkal változtatták (l. 27. ábra, alsó görbe), e finomszerkezeti vonalak nem voltak láthatók. A tapasztalat szerint



28. ábra. Különböző magreakciókban nyert neutronok energiája a bombázó részecskék energiájának függvényében. Az 1-es szám a  $0^\circ$ -ban, a 2-es a  $180^\circ$ -ban kirepülő neutronokra vonatkozik



$<1$  MeV energiaváltoztatást  $\sim 10$ , nagyobbakat  $\sim 30$  perc alatt lehet végezni a berkeleyi SFC-on, de automatizálással ez még lejjebb is szorítható.

d) Magreakciók polarizált nyalábokkal.

A magreakciók vizsgálata különösen értékes információt nyújthat, ha polarizált nyalábbal végezzük. Polarizált p nyaláb nyerhető pl.  $\alpha$  részecskék hidrogén céltárgyon való szórásával a 0 és  $1/2$  spinű részecskék spin-pálya kölcsönhatásának eredményeként. Változtatva a nyaláb energiáját, a polarizált p nyaláb energiája is arányosan változik. A SFC-ok részecskenyalábjainak nagy energiája, intenzitása és energia változtathatósága biztosítja a polarizált nyalábokkal való kísérletek sikeres keresztülvitelét. Már a szórt nyaláb polarizációs fokának meghatározása is érdekes feladat nagy energia intervallumban, tekintettel a spin-pálya kölcsönhatás alapvető magfizikai jelentőségére.

e) Egyéb magreakciók. A felsoroltakon kívül természetesen még sok más is vizsgálható SFC-okkal, pl. nehéz ionok kicserélődési és közbelső magreakciói, kollektív gerjesztések rugalmatlan ütközéssel, kevés nukleonból álló rendszerek stb.

#### IV. B. 3. Neutron nyalábok előállítása különböző magreakciókkal

Intenzív neutronforrás állítható elő izokrón ciklotronok segítségével, ha uránt protonokkal bombázunk. Pl. 1 mA erősségű 70 MeV-es proton nyalábbal urán céltárgyat bombázva  $10^{15}$  n/sec rendű neutronáram állítható elő.

Céltárgyként  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$ ,  $^9\text{Be}$  könnyű magok is használhatók, ezeket d-okkal bombázva n nyaláb nyerhető. A neutronok energiája függ a bombázó nyaláb energiájától és a reakció szögétől, így kívánság szerint változtatható. L. 28. ábra. [30].

Vannak adatok az irodalomban, amelyek szerint 5-től 30 MeV energia tartományban változtatható, 300 keV energiaszórású n nyalábot nyertek izokrón ciklotronból. A neutronok széles körben felhasználhatók alapkutatási, reaktorfejlesztési, aktivációs analízis stb. célokra.

### IV. C. Egyéb alkalmazások

#### IV. C. 1. Aktivációs analízis

Az aktivációs analízis különböző anyagok összetételének nagy érzékenységgel történő gyors meghatározására szolgál. A mintát neutronokkal vagy töltött magrészecskékkel besugározva magreakciók jönnek létre, radioaktív izotópok keletkeznek. A minta aktivitásának vizsgálata (a sugárzás fajtája, energiája, felezési ideje) — a bombázó nyaláb fluxusának és a magreakció hatáskeresztmetszetének ismeretében — lehetőséget ad a vizsgált elem mennyiségének abszolút meghatározására. Amennyiben szükséges, a fizikai mérések előtt radiokémiai elválasztást is alkalmaznak. A gyakorlatban elterjedtebb a relatív módszer: a vizsgált elem ismert mennyiségét is besugározzák és az aktivitások arányából számítják a meghatározandó elem mennyiségét. A legtöbb esetben a minták  $\gamma$  sugárzását analizálják.

A minta aktiválódását a következő egyenlettel lehet jellemezni:

$$A = f \cdot \sigma \cdot N \cdot \Theta \{1 - \exp(-\lambda t)\}, \quad (13)$$

ahol  $A$  az adott izotópból származó aktivitás (bomlás/sec),

$f$  a bombázó nyaláb fluxusa (részecske/cm<sup>2</sup>·sec),



$\sigma$  a reakció hatáskeresztmetszete ( $\text{cm}^2$ ),

$N$  a vizsgált elem atomjainak kezdeti száma a mintában,

$\Theta$  az aktiválandó izotóp részaránya a természetes izotópkeverékben,

$\lambda$  a vizsgált izotóp bomlásállandója,

$t$  besugárzási idő.

Az aktivációs analízis érzékenységet a még éppen kimutatható anyagmennyiséggel ( $m$ , pl. gr-ban) jellemezhetjük. A (13) összefüggésből következik, hogy

$$m = MN = \frac{MA}{f \cdot \sigma \cdot \Theta \{1 - \exp(-\lambda t)\}},$$

ahol  $M$  a vizsgált elem atomsúlya (pl. gr-ban),

$A$  a háttér fölött még éppen kimutatható aktivitás.

Ha feltételezzük, hogy a besugárzást  $f = 10^{13}$  neutron/ $\text{cm}^2 \cdot \text{sec}$  termikus neutron fluxussal végeztük  $t = 1$  órán keresztül és 10 bomlás/sec aktivitást még ki tudunk mutatni a háttér fölött, az aktivációs analízis érzékenysége az egyes elemekre a [31] munka szerint a következő (l. III. táblázat).

Az aktivációs analízis a legtöbb elemnél nagyságrendekkel kisebb mennyiségek kimutatását is lehetővé teszi, mint a spektroszkópiai, polarográfiai, lumineszcencia, gravimetrikus és egyéb analitikai módszerek [32, 33]. Ennek bizonyos esetekben igen nagy jelentősége lehet, pl. félvezető anyagok gyártásánál egyes szennyező anya-

gok koncentrációja  $10^{-7}\%$ -ot sem haladhatja meg. A biológiai vizsgálatok kiderítették, hogy egyes nyomelemek a rendkívül kis koncentrációjuk ellenére jelentős hatást gyakorolhatnak a szervezet működésére stb. További előnye az aktivációs analitikus módszernek a gyorsasága és automatizálhatósága. Sok esetben roncsolásmentes vizsgálat is végezhető.

A SFC-ok aktivációs analitikai vizsgálatokra előnyösen felhasználhatók a szolgáltatott nyalábok sokfélesége, nagy intenzitása, változtatható és nagy energiája miatt.

R. A. Kuznyecov könyve [34] áttekintést ad arról, hogy p, d,  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}$ ,  $\alpha$  és n bombázó nyalábokkal milyen elemek meghatározását dolgozták ki. A neutron aktivációs vizsgálatokról jó áttekintést nyújt Quittner Pál dolgozata [35].

### III. TÁBLÁZAT

Az aktivációs analízis érzékenysége az egyes elemek meghatározásánál [31]. [A bombázó részecskefluxus:

$f = 10^{13}$  neutron/ $\text{cm}^2 \cdot \text{sec}$ , a besugárzási idő:  $t = 1$  óra, az elem vizsgált aktivitása:  $A_t = 10$  bomlás/sec.]

Elem	Érzékenység (m, gr-ban)
Co, Rh, Ag, In, Eu, Dy	$10^{-12} - 10^{-11}$
V, Mn, Br, Kr, J, Lu, Th	$10^{-11} - 10^{-10}$
Al, Cl, Ar, Cu, Ga, As, Se, Nb, Pd, Pr, Sm, Ho, W, Re, Ir, Au, U	$10^{-10} - 10^{-9}$
Na, Sc, Cr, Zn, Ge, Rb, Sr, Mo, Ru, Cd, Sb, Te, Ba, La, Nd, Gd, Er, Tm, Yb, Pt, Hg, Tl	$10^{-9} - 10^{-8}$
Mg, Si, K, Ca, Ti, Ni, Y Sn, Xe, Cs, Tb, Ta, Os	$10^{-8} - 10^{-7}$
P, Ce, Hf	$10^{-7} - 10^{-6}$
S, Fe, Zr, Pb, Bi	$10^{-6}$



## IV. TÁBLÁZAT

Néhány — főleg középmeretű — ciklotron jellemző adatai

		Hagyományos ciklotron		Szektor fókuszálású ciklotron					
		Krakkó, U—120 Működik	Szovjetu., U—150 Prototíp. Működik	Michigan Áll. Egyet. Működik	Karlsruhe Működik	Philips prototíp. Működik	Dubna, U—200 Működik	Kiev, U—240 Épül	Dubna Monoener- getikus Terv
V nyaláb	Gyorsított részecskék és energiájuk E(MeV)	$d \ 12,5$ $\alpha \ 25$	$d \ 24$ $\alpha \ 48$	$p \leq 55$ más ionok is	$d \ 50$	$p \leq 30$ más ionok is	$E = 156 \frac{Z^2}{A}$ $2,8 \leq \frac{A}{Z} \leq 4,2$	$p \leq 100$ $d \leq 65$ más ionok is	$p \ 60$ $d \ 30$ $\alpha \ 60$ ${}^3\text{He} \ 80$ ${}^6\text{Li} \ 90$
	Intenzitás								
	belső ( $\mu\text{A}$ )	~1000	~1000	1000	100	1000	${}^4\text{He}^{+1} \ 200$ ${}^{12}\text{C}^{+4} \ 30$	~300	
	külső ( $\mu\text{A}$ )	40		800	20	100	Van	~150	$p \ 100$
V mágnes	Max. pályasugár (cm)	52,5	66,5	72	104	51	90	107	400
	Pólus átmérő (cm)	120	150	163	220	130	200	240	—
	Min. résméret (cm)	34,5		17,1	8	15	3	23	
	Szektorok száma	—	—	3	3	3	4	3	4
	Max. spirálszög (fok)	—	—	0	0	35	0	40	0
	Szektor tekercsek (pár/szektor)	—	—	0	5	3	0	1+4	
	Körös hangoló tekercs (pár)			8	0	10	6	15	~20
	H <sub>át</sub> a max. sugárnál (kOe)	~14		15,2	14,7	15	20	17	2,84



a IV. táblázat folytatása

		Hagyományos ciklotron		Szektor fókuszálású ciklotron					
		Krakkó U—120 Működik	Szovjetu., U—150 Prototípus Működik	Michigan Áll. Egyet. Működik	Karlsruhe Működik	Philips Prototípus Működik	Dubna U—200 Működik	Kiev, U—240 Épül	Dubna Monoener- getikus Terv
A mágnes	fő (kW)	~ 130		140	30	130	300	960 (17 k0e)	1000
	Teljesítmény mellék (kW)			9	0,1	20	100	1340	
Az RF rendszer	A duánsok száma és nyílásszöge	2, 180°	2	2, 134°	3, 40°	1, 180°	2, 45°	1, 180	2(+2) 90°
	Duánsnyílás (cm)	17,0		3,8	4	1,8	3	5	4—5
	RF $\lambda(m)$ vagy $f$ (MHz)	$\lambda$ 18—35	$\lambda$ 18—35	$f$ 13,8—21,8	$f$ 33	$f$ 5—23	$f$ 14,2—21,4	$f$ 7,5—22	
	Max. bemeneti teljesítmény (kW)	120 gen.	300 gen.	220	70	100	180	600	
	Energia növekedés max. (keV)			260	200	100	212	250	$\frac{100}{\text{ford.}}$
	Hangolás			Mozg. panel.	Fix frekv.	Mozg. rövidzár	Mozg. rövidzár	Mozg. rövidzár	
	A kihozott nyaláb energiafeloldása $\Delta E/E$ Megjegyzés	$\frac{\Delta E}{E} \sim 10^{-2}$					Gyorsítás 2-ik harmo- nikuson	$\frac{\Delta E}{E} \sim 10^{-2}$	$\frac{\Delta E}{E} \sim 10^{-4}$
Irodalom		[44], [45]	[45]	[19]	[19]	[19]	[43]	[19], [9]	[42]



#### IV. C. 2. Sugárgyógyászat, sugárbiológia

A ciklotronok által szolgáltatott töltött részecske nyalábokkal sikerrel kezelhetők rákos szövetek, pl. bőrrák. Mélyebben fekvő rosszindulatú daganatok elpusztításához azonban nagy energiájú nyalábok szükségesek. Pl. 20 cm vízmélységbe (első közelítésben a testszövetet vízzel helyettesíthetjük a nyalábfékezés szempontjából) csak  $\sim 175$  MeV-es p nyaláb tud behatolni. A nehéz töltött részecskék alkalmazása sugárterápiára egyébként azzal az előnnyel jár, hogy a nyaláb energiájának változtatásával a legerősebb szövetroncsoló hatást a kívánt mélységben érhetjük el, mivel a nehéz töltött részecske nyaláb specifikus ionizációja a pálya végén a legnagyobb.

#### IV. C. 3. Szilárd test fizika, sugárkémia

A SFC-ok által szolgáltatott intenzív, változtatható energiájú és fajtájú részecske nyalábok lehetőséget nyújtanak különböző anyagok sugárzással létrehozott átalakulásának vizsgálatára. Ennek megfelelően a SFC-ok felhasználhatók a szilárd test fizikában és a kémiában is.

#### IV. C. 4. Kémiai és izotóp analízis szórt nehéz ion nyalábbal

Nehéz ionokkal bombázva különböző anyagokat, a visszafelé szórt részecskék energiavesztése és intenzitása alapján következtetni lehet a céltárgyban levő atommagok tömegszámára és a szennyező atomok mennyiségére. Így könnyű közegekben  $10^{-3}$ — $10^{-4}$  súlyarányú nehéz elem jelenlétét sikerült kimutatni és kedvező esetben izotóp analízis is végezhető [36]. L. még [37].

Arra vonatkozóan, hogy az egyes működő izokrón ciklotronokat milyen területeken alkalmazzák, jó áttekintést nyújt a gatlinburgi konferencia anyaga [19].

### V. Néhány ciklotron jellemző adatai

1966-ban mintegy 60 SFC működött vagy állt tervezés alatt. Ezekről áttekintés található a [19] konferencia anyagában.

A IV. táblázat közli néhány ciklotron legfontosabb adatait.

Köszönettel tartozom dr. Szalay Sándor akadémikusnak a téma többszöri alapos megvitatásáért, dr. Bacsó József kutató fizikusnak a kézirat elolvasásáért és értékes megjegyzéseiért, valamint a dubnai és krakkói ciklotronokat üzemeltető mérnököknek és fizikusoknak hasznos közléseikért. Köszönettel tartozom továbbá a Nucl. Instr. Meth. folyóirat kiadójának, hogy hozzájárult a 13., 14. és 20. ábrák ez összefoglaló dolgozatba történő átvételéhez.



## IRODALOM

1. E. O. Lawrence, M. S. Livingston, Phys. Rev., 37, 1707, 1931.
2. L. H. Thomas, Phys. Rev., 54, 580, 1938.
3. J. R. Richardson, Sector Focusing Cyclotrons, Progress in Nuclear Techniques and Instrumentation, Vol. I, ed. F. J. M. Farley, North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1965. Összefoglaló munka.
4. F. T. Howard, Nucl. Instr. Meth., 18, 19, 125, 1962.
5. H. E. Conzett, B. G. Harvey, Nucleonics, 24, No 2, 48, 1966.
6. R. J. Jones, E. D. Hudson, R. S. Livingston, R. S. Lord, M. B. Marshall, W. R. Smith, W. H. White Jr., and R. E. Worsham, Nucl. Instr. Meth., 18, 19, 46, 1962.
7. W. C. Parkinson, R. S. Tickle, Nucl. Instr. Meth., 18, 19, 93, 1962.
8. C. M. Braams, P. B. Smith, Nucl. Instr. Meth., 8, 27, 1960.
9. Közlés a leningrádi Elektrofizikai Berendezések Intézetéből. 1968.
10. H. E. Conzett, IEEE Transactions on Nucl. Sci., NS-13, No 4, 313, 1966.
11. R. M. Main és munkatársai tervei. L. Nucleonics, 24, No 2, 53, 1966.
12. J. B. Marion, Nucl. Data Tables, Part 3, 1960. US Atomic Energy Com., Washington 25, D. C.
13. E. Г. Комар, Ускорители заряженных частиц, Атомиздат, Москва, 1964.
14. W. D. Allen, AVF Cyclotrons for Nuclear Structure Research, in "Nuclear Structure" ed. A. Hossian, Harun-Ar-Rashid, M. Islam, North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1967.
15. А. А. Коломенский, А. Н. Лебедев, Теория циклических ускорителей, ФИЗМАТГИЗ, Москва, 1962.
16. J. J. Livingood, Principles of Cyclic Particle Accelerators, D. Van Nostrand Co., Inc., New York, 1961.
17. M. S. Livingston, J. P. Blewett, Particle Accelerators, McGraw-Hill, New York, 1962.
18. Sector-Focused Cyclotrons, Proc. of the International Conference on Sector-Focused Cyclotrons, Los Angeles, 17—20 April, 1962. Nucl. Instr. Meth., 18, 19, 1962.
19. International Conference on Isochronous Cyclotrons, Gatlinburg, Tennessee, May 2—5, 1966. IEEE Transactions on Nucl. Sci., NS-13, No 4, 1966.
20. А. Н. Комаровский, Строительные конструкции ускорителей, Гос. изд. „Высшая Школа“, Москва, 1961.
- [21] Л. Ф. Кондрашев, Н. Н. Халдин, Оборудование для ядерных исследований, ГОС-АТОМИЗДАТ, 1961.
22. R. S. Livingston, R. J. Jones, Rev. Sci. Instr., 25, 552, 1954.
23. Э. Г. Имаев, С. И. Козлов, Р. Ц. Оганесян, С. Г. Фефилова, И. А. Шелаев, Л. П. Челноков, препринт ОИЯИ, Дубна, 9—3713, 1968.
24. Г. Н. Вялов, Ю. Ц. Оганесян, Г. Н. Флеров, ОИЯИ, препринт, Дубна, 1884, 1964.
25. И. Ф. Малышев, В. Г. Рогозинский ОИЯИ, препринт, Дубна, 1396, 1963.
26. G. Rudstam, Arkiv Fysik, 36, 9, 1967.
27. G. Rudstam, Zeitschrift für Naturforschung, 21a, 1027, 1966.
28. Fényes T., Magy. Fiz. Folyóirat, XVII, 1, 1969.
29. J. C. Clark, C. M. E. Matthews, D. J. Silvester, D. D. Vonberg, Nucleonics, June, 54, 1967. Magyar kivonat: Atomtechnikai Tájékoztató 11, 31, 1968.
30. L. pl. В. Гольданский, Е. Лейкин, Превращения атомных ядер, Изд. АН СССР, Москва, 1958, стр. 220.
31. J. W. Winchester, Progr. in Inorg. Chemistry, V 2, 1, 1961.
32. В. В. Мейнке, в сб. „Анализ следов элементов“, М., Изд. иностр. лит., 1961, стр. 569.
33. G. H. Morrison, Anal. Chem., 1962. Proc. Intern. Symp. held at Birmingham Univ., p. 320.
34. Р. А. Кузнецов, Активационный анализ, Атомиздат, Москва, 1967.
35. P. Quittner, Magy. Fiz. Folyóirat, XVI, 421, 1968.
36. С. А. Карамян, Я. Шукуров, ОИЯИ, препринт, Дубна, 2096, 1965.
37. A. Z. Hryniewicz, H. Niewodniczan'ski, L. Pomorski, report No 402/PL, Inst. Nucl. Phys., Cracow, 1965.
38. K. W. Ehlers, Nucl. Instr. Meth., 18, 19, 571, 1962.
39. A. Ghiorso, R. M. Main, B. H. Smith, IEEE Transactions on Nucl. Sci., NS-13, No 4, 280, 1966.
40. H. E. Conzett, P. Durriulat, H. G. Pugh, E. Schield, R. J. Slobodrian, UCRL-16 580, p. 48, 1966; Bull. Am. Phys. Soc., 9, 703, 1964.



41. D. J. Bredin, W. E. Burcham, D. Evans, W. M. Gibson, J. S. C. McKee, D. J. Prowse, J. Rotblat, J. N. Snyder, Proc. Roy. Soc. A251, 143, 1959.

42. А. А. Глазов, Ю. Н. Денисов, В. П. Джелепов, В. П. Дмитриевский, Б. И. Замолотчиков, Н. Л. Заплатин, В. В. Кольга, С. М. Поликанов, В. Г. Соловьев, препринт ОИЯИ, Р9-3932, 1968, Дубна.

43. И. А. Шелаев, С. И. Козлов, Р. Ц. Оганесян, Ю. Ц. Оганесян, В. А. Чугреев, препринт ОИЯИ, 9—3988, 1968.

И. А. Шелаев, С. И. Козлов, Р. Ц. Оганесян, С. Г. Фефилова, препринт ОИЯИ, Р9—4233, 1968.

Továbbá: a szerzők személyes közlése 1969 júliusában.

44. A krakkói 120 cm-es ciklotron dokumentációja.

45. Электрофизическая аппаратура промышленного изготовления. Справочник. Ред. В. А. Подошвина. ГОСАТОМИЗДАТ, Москва, 1963.







# A KEMÉNY PION MÓDSZER ALKALMAZÁSA BARION-MEZON NÉGYPONT FÜGGVÉNYEKRE

MATOLCSI TAMÁS  
Számítástechnikai Központ,  
Budapest

és

NAGY TIBOR  
Elméleti Fizikai Tanszéki Kutató Csoport,  
Budapest

(A  $\sigma$  tagok speciális kiértékelésével egy új összszabszabályt származtatunk az AAV hárompont függvényekre vonatkozó összefüggések alapján. A két barionteret tartalmazó három és négy pont függvényeket a kemény pion módszerrel tárgyaljuk, és az eredményeket alkalmazzuk a  $B \rightarrow B'\pi l\nu$  bomlásokra.)

## A hárompont függvények $SU(3) \times SU(3)$ -ban

Az áramalgebrák egyik alkalmazása, a lágy pion módszer sok esetben nem kielégítő eredményre vezet. Különböző szerzők módszereket dolgoztak ki, melyek segítségével a PCAC feltevés és az áramalgebrák a változók fizikai értékeinél is kihasználhatók. (Kemény pion módszer [1].)

A mezonoktettek kölcsönhatásainak leírását [2] tárgyalja ezzel a módszerrel. Az eredmények egy speciálisan választott szimmetriasértés alapján adódnak. A felvett Lagrange-függvény

$$L = L_0 + e^i \xi^i \quad (1)$$

alakú, ahol  $\xi^i$  lokális terek, melyek az  $SU(3) \times SU(3)$  ábrázolását adják. Ha az ábrázolás a  $(3, \bar{3}) + (\bar{3}, 3)$ , akkor a Lagrange-függvényből származtatható vektor és axiálvektor áram divergenciáinak az infinitézimális generátorokkal való felcserélése egyszerűen adódik, s ezzel az úgynevezett  $\sigma$  tagok problémája azonnal megoldódik. A Lagrange-függvény fenti alakjából többek között az  $f_{\mathcal{K}} m_{\mathcal{K}}^2 = f_K m_K^2 - f_{\pi} m_{\pi}^2$  szabály is következik, ahol  $f_i$ , ill.  $m_i$  a megfelelő mezon áramcsatolási állandója, ill. tömege. Ha ebbe behelyettesítjük a végeredményként kapott

$$f_K^2 = 1,18 f_{\pi}^2 \quad f_{\mathcal{K}}^2 = 0,34 f_{\pi}^2 \quad (2)$$

értékeket,  $m_{\mathcal{K}} = 670$  MeV nyerjük; a jelenlegi kísérleti helyzet egy 1080 MeV tömegű skalár mezon létezésére utal.

Ha (1)-ben  $\xi^i$ -k nem terek, hanem csak valamely függvények, amelyek valamely módon kapcsolatban állnak a terekkel, az  $SU(3) \times SU(3)$  sértés Gell-Mann—Renner-féle leírását kapjuk [3]. Mi ezt az utat követtük. Ekkor a fent említett ábrázolás esetén  $\xi^i(x)$ -eknek megfelelően egy  $u^i(x)$  és  $v^i(x)$   $i = 0, 1, \dots, 8$  ellenkező paritású no-nethez jutunk, amelyekből a Hamilton operátor

$$H(x) = u^0(x) + cu^8(x) \quad (3)$$



és az áramdivergenciák az ezzel való kommutátorból adódnak:

$$\partial V^i = c f^{isk} u^k \quad (4)$$

$$\partial A^i = d^{i0k} v^k + d^{isk} v^k = w(i) v^i + \sqrt{\frac{2}{3}} c \delta^{i8} v^0 \quad (5)$$

$$w(i) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2} + c}{\sqrt{3}} & i = 1, 2, 3 \\ \frac{\sqrt{2} - c}{\sqrt{3}} & i = 8 \\ \frac{2\sqrt{2} - c}{2\sqrt{3}} & i = 4, 5, 6, 7 \end{cases} \quad (6)$$

(4) és (5) alapján az  $u^i$  és  $v^i$ -kre vonatkozó felcserélési szabályokból a  $\sigma$  tagok kifejezhetők ezen függvények segítségével. Ezeket az áramdivergenciákra visszairni teljes általánosságban nem lehet; a (4) és (5) összefüggések nem megfordíthatók. Könnyen belátható, hogy a következő megszorításokat kell tennünk  $i \neq l$   $i \neq 8$  s így nyerjük a  $\sigma$  tagokra:

$$\begin{aligned} [V_0^i(x), \partial A^l(y)]_{x_0=y_0} &= i \frac{w(l)}{w(k)} f^{ilk} \partial A^k(x) \delta(x-y) \\ [A_0^i(x), \partial V^l(y)]_{x_0=y_0} &= i \frac{\sqrt{3}c}{2w(k)} e^{ilk} \partial A^k(x) \delta(x-y) \quad \frac{\sqrt{3}}{2} e^{ilk} = d^{ijk} f^{lsj} \\ [A_0^i(x), \partial A^l(y)]_{x_0=y_0} &= i \frac{2w(l)}{\sqrt{3}c} h^{ilk} \partial V^k(x) \delta(x-y) \quad \frac{\sqrt{3}}{2} h^{ilk} = d^{ilj} f^{jsk} \end{aligned} \quad (7)$$

A valódi vertexek definícióját [4] szerint adjuk meg, egy kissé módosított jelöléssel. Például

$$\left| t = q - k \quad c_k = \frac{f_k m_k^2}{\sqrt{2}} \right|$$

$$\begin{aligned} \int e^{-iqx} e^{iky} \langle T \{ \partial A^i(x) A_v^l(y) \partial V^j(0) \} \rangle d^4x d^4y &= \frac{c_i}{q^2 + m_i^2} \frac{c_j}{t^2 + m_j^2} A_{v\lambda}(k; l) \Gamma_\lambda^{ilj}(q, k) - \\ &- i \frac{k_v}{m_i^2} \frac{c_i}{q^2 + m_i^2} \frac{c_l}{k^2 + m_l^2} \frac{c_j}{t^2 + m_j^2} \Gamma^{ilj}(q, k). \end{aligned} \quad (8)$$

(A felülhúzott SU(3) indexhez tartozik Lorentz index.)

Látható az előállításból, hogy a vertexek az alábbi keresztezési szimmetriával rendelkeznek:

$$\begin{aligned} \Gamma^{ilj}(q, k) &= \Gamma^{lij}(-k, -q) & \Gamma_\rho^{ilj}(q, k) &= \Gamma_\rho^{lij}(-k, -q) \\ \Gamma_{\mu\nu}^{ilj}(q, k) &= \Gamma_{\nu\mu}^{lij}(-k, -q) & \Gamma_{\mu\nu\rho}^{ilj}(q, k) &= \Gamma_{\nu\mu\rho}^{lij}(-k, -q) \end{aligned}$$



A Ward-identitások felírásánál azt az utat követtük, hogy az időrendezett szorzat alól kihoztuk a differenciálást. Így például a (8)-ban szereplő hárompont függvény re két, egymástól nem független Ward-identitás adódik: egyszer az egyik, másszor a másik differenciálás kihozatalával. Az így kapott Ward-identitások bizonyos kombinációit átírva vertexekre, mindig két vertex között jön létre összefüggés. Ezek aztán alkalmasak arra is, hogy minden vertexet megadhassunk az

$$\begin{aligned} ig_i g_j g_l \Gamma_{\mu\nu\varrho}^{ijl}(q, k) = & \eta_1^{ijl} [\delta_{\mu\nu}(q+k)_\varrho - \delta_{\mu\varrho}(t+q)_\nu + \delta_{\nu\varrho}(t-k)_\mu] + \\ & + \eta_2^{ijl} [\delta_{\mu\varrho} t_\nu - \delta_{\nu\varrho} t_\mu] + \\ & + \eta_3^{ijl} [\delta_{\mu\nu} t_\varrho - \delta_{\mu\varrho} q_\nu + \delta_{\nu\varrho} k_\mu] \end{aligned} \quad (9)$$

primitív függvény segítségével. Az egyenletek a következők:

$$\frac{f_l}{\sqrt{2}} \Gamma^{ijl}(q, k) + iC(l) k_\nu \Gamma_{\nu}^{ijl}(q, k) = \frac{2w(i)}{\sqrt{3}c} h^{lij} \frac{c_j}{c_i} (q^2 + m_i^2) + \frac{\sqrt{3}c}{2w(i)} e^{lji} \frac{c_i}{c_j} (t^2 + m_j^2) \quad (10)$$

$$\frac{f_j}{\sqrt{2}} \Gamma^{ijl}(q, k) + iC(j) t_\varrho \Gamma_{\varrho}^{ijl}(q, k) = \frac{w(i)}{w(l)} f^{ilj} \frac{c_l}{c_i} (q^2 + m_i^2) - \frac{w(j)}{w(i)} f^{ilj} \frac{c_i}{c_l} (k^2 + m_i^2) \quad (11)$$

$$\frac{f_l}{\sqrt{2}} \Gamma_{\varrho}^{ijl}(q, k) + iC(l) k_\nu \Gamma_{\nu\varrho}^{ijl}(q, k) = -ic_i \Delta_{\varrho\lambda}^{-1}(t; j) \left[ f^{ilj} \frac{q_\lambda}{m_i^2} - e^{lji} \frac{\sqrt{3}c}{2w(i)} \frac{t_\lambda}{m_j^2} \right] \quad (12)$$

$$\frac{f_j}{\sqrt{2}} \Gamma_{\nu}^{ijl}(q, k) + iC(j) t_\varrho \Gamma_{\nu\varrho}^{ijl}(q, k) = -ic_i \Delta_{\nu\lambda}^{-1}(k; l) f^{ilj} \left[ \frac{q_\lambda}{m_i^2} - \frac{w(j)}{w(i)} \frac{k_\lambda}{m_i^2} \right] \quad (13)$$

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} \Gamma_{\nu}^{ijl}(q, k) - iC(i) q_\mu \Gamma_{\mu\nu}^{ijl}(q, k) = ic_j \Delta_{\nu\lambda}^{-1}(k; l) \left[ f^{ilj} \frac{t_\lambda}{m_j^2} + h^{lij} \frac{2w(l)}{\sqrt{3}c} \frac{k_\lambda}{m_l^2} \right] \quad (14)$$

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} \Gamma_{\nu\varrho}^{ijl}(q, k) - iC(i) q_\mu \Gamma_{\mu\nu\varrho}^{ijl}(q, k) = f^{ilj} [\Delta_{\nu\varrho}^{-1}(t; j) - \Delta_{\nu\varrho}^{-1}(k; l)] \quad (15)$$

$$\frac{f_j}{\sqrt{2}} \Gamma_{\mu\nu}^{ijl}(q, k) + iC(j) t_\varrho \Gamma_{\mu\nu\varrho}^{ijl}(q, k) = f^{ilj} [\Delta_{\mu\nu}^{-1}(k; l) - \Delta_{\mu\nu}^{-1}(q; i)] \quad (16)$$

Ezekből, a keresztezési szimmetriák felhasználásával, egy érdekes összszabályt kaphatunk. Végezzük el a (10) és (14) egyenletben az  $i \leftrightarrow l$ ,  $q \leftrightarrow -k$  helyettesítést, s aztán kombináljuk őket az eredetivel. Az így előállt új egyenletek egyik oldala azonos alakra hozható, s így a másik oldalak egyenlőségéből, mivel az bármely  $t^2$  mellett igaz, az együtthatókból:

$$\frac{f_{\mathcal{K}}^2 m_{\mathcal{K}}^2}{3c} = \frac{f_{\pi}^2 m_{\pi}^2}{2(\sqrt{2} + c)} - \frac{f_K^2 m_K^2}{2\sqrt{2} - c} \quad (17)$$

Könnyen belátható, hogy az  $f_+(0)$ -ra és  $\Gamma(K^* \rightarrow K\pi)$ -ra a [2]-ben végrehajtott-hoz hasonló számításokból a  $c$  konstans kiesik, s ugyanaz a végeredmény adódik. Így felhasználva a (2) értékeket, (17) összefüggést létesít  $m_{\mathcal{K}}$  és  $c$  között. Ebből először, hogy  $c$  valós legyen, megszorítást kapunk a  $\mathcal{K}$  mezon tömegére:  $m_{\mathcal{K}} > 1080$  MeV, vagy  $m_{\mathcal{K}} < 620$  MeV; másodszer a (2) kísérleti adatokkal  $c = -1,9$  lesz. A [3]-beli  $c = -1,25$  eredményt akkor kapjuk, ha  $f_{\mathcal{K}} = 0$ ,  $f_K = f_{\pi}$ .



*A kemény pion módszer alkalmazása barion-mezon vertexekre*

A barionok és mezonok közötti kölcsönhatások leírására a kemény pion módszer hasonlóan alkalmazható mint az előzőekben, azzal a különbséggel, hogy itt a barionterek explicite bennmaradnak az időrendezett szorzatban, mivel nem fejezhetők ki áramokkal. Így a Ward-identitások felírásánál megjelennek az áram-bariontér kommutátorok. Ezek feltevésünk szerint a következők:

$$\begin{aligned} [V_0^i(x), \psi^{\alpha}(y)]_{x_0=y_0} &= if^{i\alpha\beta} \psi^{\beta}(x) \delta(x-y) \\ [V_0^i(x), \bar{\psi}^{\alpha}(y)]_{x_0=y_0} &= if^{i\alpha\beta} \bar{\psi}^{\beta}(x) \delta(x-y) \\ [A_0^i(x), \psi^{\alpha}(y)]_{x_0=y_0} &= if^{i\alpha\beta} \gamma_5 \psi^{\beta}(x) \delta(x-y) \\ [A_0^i(x), \bar{\psi}^{\alpha}(y)]_{x_0=y_0} &= -if^{i\alpha\beta} \bar{\psi}^{\beta}(x) \gamma_5 \delta(x-y) \end{aligned} \quad (18)$$

A későbbiek során a sok írás elkerülése végett egyes helyeken a barionok indexeit nem írjuk ki, ekkor (18)-ban bevezetjük az  $(F^i)_{\alpha\beta} = -if^{i\alpha\beta}$  nyolcas mátrixot. További jelöléseink: a tömegeket és csatolási állandókat is oktett indexszel látjuk el, például  $m_i = m_{\pi}$   $i=1, 2, 3$ . Ezekre a többszörös indexekre nem kell összegezni. A pszeudoskalár részek tömegét  $m_i$ , az axiálvektor részek tömegét  $M_i$  jelöli.  $c_i = \frac{f_i m_i^2}{\sqrt{2}}$  a PCAC-ben szereplő konstans. A skalár, illetve vektor részek minden megfelelő mennyiségét csillaggal látjuk el.

*A hárompont függvények*

Az impulzusokra az  $s = r - r'$  összefüggéssel a valódi vertexek definíciója:

$$\int e^{-ir'x} e^{iry} \langle T \{ \psi^{\alpha'}(x) \bar{\psi}^{\alpha}(y) \partial A^i(0) \} \rangle d^4x d^4y = -i \frac{c_i}{s^2 + m_i^2} S(r') A^{\alpha' \alpha i}(r' r) S(r) \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \int e^{-ir'x} e^{iry} \langle T \{ \psi^{\alpha'}(x) \bar{\psi}^{\alpha}(y) A_{\mu}^i(0) \} \rangle d^4x d^4y &= -i \Delta_{\mu q}(s; i) S(r') A_{\mu}^{\alpha' \alpha i}(r' r) S(r) + \\ &+ \frac{s_{\mu}}{m_i^2} \frac{c_i}{s^2 + m_i^2} S(r') A^{\alpha' \alpha i}(r' r) S(r) \end{aligned} \quad (20)$$

$$\int e^{-ir'x} e^{iry} \langle T \{ \psi^{\alpha'}(x) \bar{\psi}^{\alpha}(y) \partial V^i(0) \} \rangle d^4x d^4y = -i \frac{c_i^*}{s^2 + m_i^{*2}} S(r') \Gamma^{\alpha' \alpha i}(r' r) S(r) \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \int e^{-ir'x} e^{iry} \langle T \{ \psi^{\alpha'}(x) \bar{\psi}^{\alpha}(y) V_{\mu}^i(0) \} \rangle d^4x d^4y &= -i \Delta_{\mu q}^*(s; i) S(r') \Gamma_{\mu}^{\alpha' \alpha i}(r' r) S(r) + \\ &+ \frac{s_{\mu}}{m_i^{*2}} \frac{c_i^*}{s^2 + m_i^{*2}} S(r') \Gamma^{\alpha' \alpha i}(r' r) S(r) \end{aligned} \quad (22)$$

A Ward-identitások igen egyszerűen átírhatók vertexekre, s így nyerjük:

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} A^{\alpha' \alpha i}(r' r) = iC(i) s_{\mu} A_{\mu}^{\alpha' \alpha i}(r' r) - if^{\alpha' \alpha i} [S^{-1}(r') \gamma_5 + \gamma_5 S^{-1}(r)] \quad (23)$$

$$\frac{f_i^*}{\sqrt{2}} \Gamma^{\alpha' \alpha i}(r' r) = iC^*(i) s_{\mu} \Gamma_{\mu}^{\alpha' \alpha i}(r' r) - if^{\alpha' \alpha i} [S^{-1}(r') - S^{-1}(r)] \quad (24)$$



Mivel egyenleteink az (axiál) vektor vertexekre semmi megszorítást nem adnak, feltesszük, hogy azok konstansok:

$$A_{\mu}^{\alpha' ai}(r' r) = L^{\alpha' ai} \gamma_{\mu} \gamma_5 \quad (25)$$

$$\Gamma_{\mu}^{\alpha' ai}(r' r) = G^{\alpha' ai} \gamma_{\mu} \quad (26)$$

A fenti vertexekben szereplő simasági konstansok kapcsolatba hozhatók az (axiál) vektor formfaktorokkal, s így ismert mennyiségekkel adhatók meg. Az (axiál) vektor áram mátrixeleme barionok között:

$$\langle B^{\alpha'}(r') | V_{\mu}^i | B^{\alpha}(r) \rangle = i \bar{u}(r') [a_1^{\alpha' ai} \gamma_{\mu} + a_2^{\alpha' ai} \sigma_{\mu\nu} s_{\nu} + i a_3^{\alpha' ai} s_{\mu}] u(r) \quad (27)$$

$$\langle B^{\alpha'}(r') | A_{\mu}^i | B^{\alpha}(r) \rangle = i \bar{u}(r') [b_1^{\alpha' ai} \gamma_{\mu} + b_2^{\alpha' ai} \sigma_{\mu\nu} s_{\nu} + i b_3^{\alpha' ai} s_{\mu}] \gamma_5 u(r) \quad (28)$$

Ha most kiredukáljuk a barionokat, a mátrixelemekben épp a (20) és (22) háromponti függvények jelennek meg. Ezeket átírjuk a simasági konstansokkal kifejtett vertexekre; a mezonokra a szabad tér propagátorokat írjuk be, és figyelembe vesszük, hogy az egész kifejezést spinorok közé kell fogni, az egyes együtthatókból a következők adódnak:

$$a_1 = \frac{g^{*2}}{s^2 + M^{*2}} G \quad b_1 = \frac{g^2}{s^2 + M^2} L \quad (29)$$

$$a_2 = 0 \quad b_2 = 0$$

$$a_3 = -a_1(0) (m - m') \left[ \frac{1}{s^2 + m^2} - \frac{1}{s^2 + M^2} \right]; \quad (30)$$

$$b_3 = b_1(0) (m + m') \left[ \frac{1}{s^2 + m^{*2}} - \frac{1}{s^2 + M^{*2}} \right]$$

A simasági konstansok (29)-ből határozhatók meg, s ezzel

$$A_{\mu}^{\alpha' ai}(r' r) = \frac{M_i^2}{g_i^2} b_1^{\alpha' ai}(0) \gamma_{\mu} \gamma_5 \quad \Gamma_{\mu}^{\alpha' ai}(r' r) = \frac{M_i^{*2}}{g_i^{*2}} a_1^{\alpha' ai}(0) \gamma_{\mu} \quad (31)$$

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} A^{\alpha' ai}(r' r) = i b_1^{\alpha' ai}(0) \hat{s} \gamma_5 - i f^{\alpha' ai} [(i \hat{r}' + m') \gamma_5 + \gamma_5 (i \hat{r} + m)] \quad (32)$$

$$\frac{f_i^*}{\sqrt{2}} \Gamma^{\alpha' ai}(r' r) = i a_1^{\alpha' ai}(0) \hat{s} - i f^{\alpha' ai} [(i \hat{r}' + m') - (i \hat{r} + m)] \quad (33)$$

(32)-ben könnyű felismerni az általánosított Goldberger—Treiman relációt. Ha ugyanis az egyenlőséget a megfelelő spinorok közé vesszük, a bal oldal definíciószerűen a barion-barion-mezon csatolási állandót adja ( $g^{\alpha' ai}$ ) a jobb oldalon pedig egyszerű átalakításokkal:

$$g^{\alpha' ai} = \sqrt{2} \frac{m_{\alpha} + m_{\alpha'}}{f_i} b_1^{\alpha' ai}(0) \quad (34)$$

Eredményünk, a Goldberger—Treiman reláció vertex nyelvén való megfogalmazása (vö. [4]).



### A négy pont függvények

A négy pont függvényekre hasonló, kissé hosszadalmasabb számolás végezhető el. A valódi vertexek definíciója is értelemszerűen ugyanolyan, ezért most nem részletezzük. Itt azonban a Ward-identitások átírva vertexekre még nem adnak megfelelő egyenleteket a simasági feltevés alkalmazására, mert a vertexeknek még pólusai vannak, az  $s$ ,  $u$ ,  $t$  csatornában; ezek sémája:



A pólusok leszeparálása után jutunk a vertexek sima részéhez. Mint látszik, a  $t$  csatornabeli pólusjárulék felírásához szükségünk van a mezon hárompont függvényekre is. Mivel azonban egyenleteink két-két vertexet kötnek össze, a pólus leválasztásához két pólusjárulék bizonyos kombinációját kell meghatározni. A mezon vertexekre a (10)–(16) egyenletek éppen ezeket a kombinációkat fejezik ki ismert mennyiségekkel. A pólus leválasztást célszerű csak azokban az egyenletekben végrehajtani, amelyekben a két Lorentz-indexű vertexek szerepelnek; ugyanis ezekre nincs semmi megszorítás, konstansok szerint fejtjük ki őket. Viszont a számolásoknál úgyis a teljes vertexekre van szükségünk, tehát ahol lehet, megtartjuk őket. A sima részeket  $s$  indexel látva el, egyenleteink végül a következők: ( $p' + q = p + k$ )

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} s A_{\mu}^{il}(p' p q) = iC(i) q_{\mu} s A_{\mu}^{il}(p' p q) - f^{ilj} A_{\mu}^j(p' p) + iF^i \gamma_5 \Gamma_{\mu}^l(p + k, p) + i\Gamma_{\mu}^l(p', p' - k) \gamma_5 F^i \quad (35)$$

$$\frac{f_i^*}{\sqrt{2}} s A_{\mu}^{il}(p' p q) = -iC^*(l) k_{\mu} A_{\mu}^{il}(p' p q) + f^{ilj} A_{\mu}^j(p' p) - iF^i A_{\mu}^l(p - q, p) + iA_{\mu}^l(p', p' + q) F^i \quad (36)$$

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} s \Gamma_{\mu}^{il}(p' p q) = iC(i) q_{\mu} \Gamma_{\mu}^{il}(p' p q) - f^{ilj} \Gamma_{\mu}^j(p' p) + iF^i \gamma_5 A_{\mu}^l(p + k, p) + iA_{\mu}^l(p', p' - k) \gamma_5 F^i \quad (37)$$

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} A^{il}(p' p q) = iC(i) q_{\mu} A_{\mu}^{il}(p' p q) - \frac{\sqrt{3}c}{2w(j)} e^{ilj} \frac{c_j}{c_i^*} \frac{k^2 + m_l^{*2}}{(p - p')^2 + m_j^2} A^j(p' p) - i\Gamma^l(p', p' - k) F^i S(p' - k) \gamma_5 S^{-1}(p) - iS^{-1}(p') \gamma_5 S(p + k) F^i \Gamma^l(p + k, p) \quad (38)$$

$$\frac{f_i^*}{\sqrt{2}} A^{il}(p' p q) = -iC^*(l) k_{\nu} A_{\nu}^{il}(p' p q) + \frac{w(i)}{w(j)} f^{ilj} \frac{c_j}{c_i} \frac{q^2 + m_i^2}{(p - p')^2 + m_j^2} A^j(p' p) + iA^i(p', p' + q) F^l S(p' + q) S^{-1}(p) - iS^{-1}(p') S(p - q) F^l A^i(p - q, p) \quad (39)$$

$$\frac{f_i}{\sqrt{2}} \Gamma^{il}(p' p q) = iC(l) k_{\mu} \Gamma_{\mu}^{il}(p' p q) - \frac{2w(l)}{\sqrt{3}c} h^{ilj} \frac{c_j^*}{c_i} \frac{q^2 + m_i^2}{(p - p')^2 + m_j^{*2}} \Gamma^j(p' p) - iA^i(p', p' + q) F^l S(p' + q) \gamma_5 S^{-1}(p) - iS^{-1}(p') \gamma_5 S(p - q) F^l A^i(p - q, p) \quad (40)$$



A simasági feltevés:

$$i^s \Gamma_{\mu\nu}^{x'ail}(p'pq) = A^{x'ail} \delta_{\mu\nu} + iB^{x'ail} \sigma_{\mu\nu} \quad (41)$$

$$i^s \Lambda_{\mu\nu}^{x'ail}(p'pq) = [C^{x'ail} \delta_{\mu\nu} + iD^{x'ail} \sigma_{\mu\nu}] \gamma_5 \quad (42)$$

$\Gamma_{\mu\nu}$  és  $\Lambda_{\mu\nu}$  pólusait explicite is meg kell határozni, hiszen ezeket a valódi vertexek megkapásához vissza kell adnunk. Itt már megjelennek a mezon simasági konstansok is. Így végül a (35)–(40) egyenletek segítségével előállítható az összes vertex ezen konstansok erejéig. Mi ezt nem végeztük el, mert olyan folyamatokat vizsgáltunk, ahol az egyik mezon mindig a pszeudoskalár oktett tagja, s ekkor egyszerűbb egyenleteken keresztül érünk célra, ha  $\Gamma_\mu$  és  $\Lambda_\mu$  (35)–(36)-ból számítható sima részéhez adjuk hozzá a pólusokat.

#### $B_{l_4}$ bomlások

Az általunk vizsgált négy pont függvények legkézenfekvőbb alkalmazása a mezon-barion szórás vizsgálata lenne. A pion-nukleon szórásra [4] végzett ilyen analízist, amely jól reprodukálja az  $S$  hullámú (+)  $I$ -spin amplitúdókat; a (–)  $I$ -spin amplitúdókra a helyzet eléggé ellentmondásos. A teljes mezon-barion oktetre a kísérleti adatok jóval szegényesebbek, és kíváncsún lenne az  $SU(3)$  sértés megfelelő figyelembe vétele. Mi itt csak a  $B \rightarrow B' \pi l \nu$  bomlásokat vizsgáljuk. Ekkor az átmeneti valószínűséghez  $\langle B' \pi | I_\mu | B \rangle$  típusú mátrixelemeket kell kiszámolni, s ezek egyszerűen kapcsolatba hozhatók a valódi vertexekkel.

$$\langle B'(p') \pi^i(q) | A_\mu^I | B(p) \rangle = i \bar{u}(p') M_\mu^{il}(p'pq) u(p) \quad (43)$$

$$\langle B'(p') \pi^i(q) | V_\mu^I | B(p) \rangle = i \bar{u}(p') N_\mu^{il}(p'pq) u(p) \quad (44)$$

Mivel ilyen bomlásoknál a barionok ritkasága mindig megváltozik,  $l=4,5$  lehetséges, s ennek megfelelően a továbbiakban a mezonok csatolási állandóját és tömegét a megfelelő részecske indexszel látjuk el. A redukciós formulát alkalmazva a fenti mátrixelemekben épp egy négy pont függvény jelenik meg. Ezeket vertexekre átírva a (38)–(40) egyenletek felhasználásával nyerjük.

$$M_\mu^{il}(p'pq) = - \frac{g_{KA}^2}{k^2 + m_{KA}^2} \left[ \delta_{\mu\nu} - k_\mu k_\nu \frac{m_{KA}^2 - m_K^2}{m_{KA}^2 (k^2 + m_{KA}^2)} \right] \Gamma_\nu^{il}(p'pq) \quad (45)$$

$$N_\mu^{il}(p'pq) = - \frac{g_{K^*}^2}{k^2 + m_{K^*}^2} \left[ \delta_{\mu\nu} - k_\mu k_\nu \frac{m_{K^*}^2 - m_{K^*}^2}{m_{K^*}^2 (k^2 + m_{K^*}^2)} \right] \Lambda_\nu^{il}(p'pq) \quad (46)$$

A vertexek alakját felhasználva a differenciális hatáskeresztmetszetek, az átmeneti valószínűségek megadhatók a simasági konstansok segítségével. A hatáskeresztmetszetek fázisanalíziséből [5] például a konstansok fittelhetők, sőt az elmélet ellenőrizhető. Sajnos pillanatnyilag még ilyen kísérleti eredmények nem állnak a rendelkezésünkre.

A további számolások a legáttekinthetőbbek, ha az amplitúdókat kifejtjük a változók szerint a legáltalánosabb formában, s aztán a kifejtési együtthatókra adunk meg összefüggéseket.

$$i M_\mu(p'pq) = i\alpha_1 P_\mu + i\alpha_2 k_\mu + i\alpha_3 q_\mu + \alpha_4 \gamma_\mu + \alpha_5 P_\mu \hat{k} + \alpha_6 k_\mu \hat{k} + \alpha_7 q_\mu \hat{k} + \alpha_8 \sigma_{\mu\nu} q_\nu \quad (47)$$

$$i N_\mu(p'pq) \gamma_5 = i\beta_1 P_\mu + i\beta_2 k_\mu + i\beta_3 q_\mu + \beta_4 \gamma_\mu + \beta_5 P_\mu \hat{k} + \beta_6 k_\mu \hat{k} + \beta_7 q_\mu \hat{k} + \beta_8 \sigma_{\mu\nu} q_\nu \quad (48)$$



A mindenütt azonos  $\alpha'_{ail}$  oktett indexeket elhagytuk, és  $P = \frac{1}{2}(p + p')$ .

A soron következő feladat tehát a vertexek konkrét alakjának meghatározása. A (35)–(37) egyenletekből megkapjuk  $\Gamma_\mu$  és  $\Lambda_\mu$  vertexek sima részét, a hármas vertexek ismeretében a hozzáadandó pólusok explicite kifejezhetők. A formulák nagy mértékben egyszerűsödnek, ha a kézenfekvő  $\frac{k^2}{\mu^2} \approx 0$  elhanyagolást tesszük, ahol  $\mu$  bármely barion vagy ritka mezon tömege. Így nyerjük végül ( $a_1^{x'zi}(0) = a^{x'zi}$ ,  $b_1^{x'zi}(0) = b^{x'zi}$  jelöléssel):

$$\alpha_1 = \alpha_5 = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_2 &= \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K_A}^2}{m_{K_A}^2} \left( \frac{1}{m_K^2} - \frac{1}{m_{K_A}^2} \right) (A^{x'zil} qk - 2B^{x'zil} Pk) + S - Z + \\ &\quad + if^{ilj} a^{jx'z} g_{K_A}^{-1} \frac{f_\pi^2}{f_{\mathcal{K}}^2} \left( qk - \frac{2\sqrt{2} - c}{2(\sqrt{2} + c)} \frac{m_\pi^2}{m_K^2} m_{K_A}^2 \right) \frac{m - m'}{(p - p')^2 + m_{\mathcal{K}}^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_3 &= b^{x'\beta i} b^{\beta zl} \frac{2m'}{2p'q + q^2} - b^{x'\beta l} b^{\beta zi} \frac{2m}{2pq - q^2} - \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K_A}^2}{m_{K_A}^2} A^{x'zil} - \\ &\quad - S + Z - if^{ilj} a^{jx'z} \frac{f_\pi^2}{f_{\mathcal{K}}^2} \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}} \frac{m - m'}{(p - p')^2 + m_{\mathcal{K}}^2} \\ |S| &= if^{ilj} a^{jx'z} \left[ \frac{2g_{K^*}^2 g_{K_A}}{f_{\mathcal{K}}^2 ((p - p')^2 + m_{\mathcal{K}}^2)} \left( \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}^2} - \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}^2} \right) - \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}} \right] \frac{m - m'}{(p - p')^2 + m_{K^*}^2} \\ Z &= i(\eta_2 - \eta_1) ilj a^{jx'z} \frac{g_A}{m_A^2} \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}} \frac{m - m'}{(p - p')^2 + m_{K^*}^2} \quad (49) \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_4 &= if^{ilj} a^{jx'z} \left[ \left( \frac{g_{K_A}^2}{m_{K_A}^2} \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}^2} - 1 \right) \frac{m_{K^*}^2}{(p - p')^2 + m_{K^*}^2} - \frac{g_{K_A}^2}{m_{K_A}^2} \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}^2} \right] - \\ &\quad - (b^{x'\beta i} b^{\beta zl} - b^{x'\beta l} b^{\beta zi}) \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_6 &= - \left[ f^{ilj} \left( b^{jx'z} - a^{jx'z} \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}^2} \frac{g_{K_A}^2}{m_{K_A}^2} \right) + (m - m') \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K_A}^2}{m_{K_A}^2} B^{x'zil} \right] \left( \frac{1}{m_K^2} - \frac{1}{m_{K_A}^2} \right) - \\ &\quad - ig_{K_A}^{-1} f^{ilj} a^{jx'z} + \frac{Z}{m - m'} \frac{m_{K^*}^2}{(p - p')^2 + m_{K^*}^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_7 &= i(\eta_3 - \eta_2) ilj a^{jx'z} \frac{g_A}{m_A^2} \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}} \frac{1}{(p - p')^2 + m_{K^*}^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_8 &= b^{x'\beta i} b^{\beta zl} \frac{2m'}{2p'q + q^2} + b^{x'\beta l} b^{\beta zi} \frac{2m}{2pq - q^2} - \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K_A}^2}{m_{K_A}^2} B^{x'zil} \end{aligned}$$



$$\beta_1 = \beta_5 = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_2 &= \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K^*}^2}{m_{K^*}^2} \left( \frac{1}{m_{\mathcal{K}}^2} - \frac{1}{m_{K^*}^2} \right) (C^{\alpha' \alpha il} qk - 2D^{\alpha' \alpha il} Pk) - S' + Z' + \\ &\quad + if^{ilj} b^{j\alpha' \alpha} g_{K^*}^{-1} \frac{f_\pi^2}{f_K^2} \left( qk - \frac{2\sqrt{2}-c}{2(\sqrt{2}+c)} \frac{m_\pi^2}{m_{\mathcal{K}}^2} m_{K^*}^2 \right) \frac{m+m'}{(p-p')^2 + m_K^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_3 &= b^{\alpha' \beta i} a^{\beta \alpha l} \frac{2m'}{2p'q + q^2} + a^{\alpha' \beta l} b^{\beta \alpha i} \frac{2m}{2pq - q^2} - \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K^*}^2}{m_{K^*}^2} C^{\alpha' \alpha il} + \\ &\quad + S' - Z' - if^{ilj} b^{j\alpha' \alpha} \frac{f_\pi^2}{f_K^2} \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}} \frac{m+m'}{(p-p')^2 + m_K^2} \\ \left| S' \right. &= if^{ilj} b^{j\alpha' \alpha} \left[ \frac{2g_{K_A}^2 g_{K^*}}{f_K^2 ((p-p')^2 + m_K^2)} \left( \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}^2} - \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}^2} \right) - \frac{m_{K^*}^2}{g_{K^*}} \right] \frac{m+m'}{(p-p')^2 + m_{K_A}^2} \\ Z' &= i(\eta_3 - \eta_1)^{ijl} b^{j\alpha' \alpha} \frac{g_A}{m_A^2} \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}} \frac{m+m'}{(p-p')^2 + m_{K_A}^2} \quad (50) \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_4 &= if^{ilj} b^{j\alpha' \alpha} \left[ \left( \frac{g_{K^*}^2}{m_{K^*}^2} \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}^2} - 1 \right) \frac{m_{K_A}^2}{(p-p')^2 + m_{K_A}^2} - \frac{g_{K^*}^2}{m_{K^*}^2} \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}^2} \right] - \\ &\quad - (b^{\alpha' \beta i} a^{\beta \alpha l} - a^{\alpha' \beta l} b^{\beta \alpha i}) \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_6 &= - \left[ f^{ilj} \left( a^{j\alpha' \alpha} - b^{j\alpha' \alpha} \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}^2} \frac{g_{K^*}^2}{m_{K^*}^2} \right) - (m-m') \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K^*}^2}{m_{K^*}^2} D^{\alpha' \alpha il} \right] \left( \frac{1}{m_{\mathcal{K}}^2} - \frac{1}{m_{K^*}^2} \right) + \\ &\quad + ig_{K^*}^{-1} f^{ilj} b^{j\alpha' \alpha} - \frac{Z'}{m+m'} \frac{m_{K_A}^2}{(p-p')^2 + m_{K_A}^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_7 &= i(\eta_2 - \eta_3)^{ijl} b^{j\alpha' \alpha} \frac{g_A}{m_A^2} \frac{m_{K_A}^2}{g_{K_A}} \frac{1}{(p-p')^2 + m_{K_A}^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_8 &= b^{\alpha' \beta i} a^{\beta \alpha l} \frac{2m'}{2p'q - q^2} - a^{\alpha' \beta l} b^{\beta \alpha i} \frac{2m}{2pq - q^2} - \frac{g_A^2}{m_A^2} \frac{g_{K^*}^2}{m_{K^*}^2} D^{\alpha' \alpha il} \end{aligned}$$

Érdekes összehasonlítani eredményünket azzal, ami a lágy pionos számításból adódik. A szokásos módszer szerint — mint például a hiperonok nemleptonos bomlásánál is [6] — nem magáról a mátrixelemről, hanem a mátrixelem és a Born pólusok ( $B(p'pq)$ ) különbségéről tesszük fel, hogy simán extrapolálható a  $q \rightarrow 0$  esetre. Ezzel:

$$\langle B' \pi^i(q) | A_\mu^i | B \rangle = \frac{\sqrt{2}}{f_\pi} f^{ilj} \langle B' | V_\mu^j | B \rangle + B_\mu^{il}(p'pq) - \lim_{q \rightarrow 0} [q_\nu T_{\nu\mu}^{il}(p'pq) + B_\mu^{il}(p'pq)]$$

Az (axiál) vektor áram mátrixelemeinek (27)–(28) alatti alakjában szereplő formfaktorokra alkalmazhatjuk a (29)–(30) összefüggéseket. A mi közelítésünkben  $a_3$ -ban és  $b_3$ -ban  $k^2 \approx 0$  a tömegnégyzetek mellett. Azonkívül, mivel  $q=0$  helyen kell venni



a mátrixelemet, benne  $(p-p')_\mu = -k_\mu$  írható. A  $T_{\nu\mu}$  felületi tagban két áram kommutátora szerepel, könnyű a pólusjárulékot meghatározni, s így már egyszerűen számítható a  $q \rightarrow 0$  határeset. Néhány átalakítással elérhető, hogy a független tagok a (47)–(48) kifejezésnek megfelelőek legyenek. Az így nyert együttthatók az alábbiak:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \alpha_5 = \alpha_7 = 0 \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_2 &= -if^{ilj} a^{jx'\alpha} (m-m') \left( \frac{1}{m_K^2} - \frac{1}{m_{K^*}^2} \right) \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_3 &= b^{x'\beta i} b^{\beta z l} \frac{2m'}{2p'q + q^2} - b^{x'\beta l} b^{\beta z i} \frac{2m}{2pq - q^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_4 &= if^{ilj} a^{jx'\alpha} - (b^{x'\beta i} b^{\beta z l} - b^{x'\beta l} b^{\beta z i})\end{aligned}\quad (52)$$

$$\begin{aligned}\alpha_6 &= -\alpha_8 (m+m') \left( \frac{1}{m_K^2} - \frac{1}{m_{K^*}^2} \right) \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \alpha_8 &= b^{x'\beta i} b^{\beta z l} \frac{2m'}{2p'q + q^2} + b^{x'\beta l} b^{\beta z i} \frac{2m}{2pq - q^2} \\ \beta_1 &= \beta_5 = \beta_7 = 0 \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_2 &= if^{ilj} b^{jx'\alpha} (m+m') \left( \frac{1}{m_{K^*}^2} - \frac{1}{m_K^2} \right) \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_3 &= b^{x'\beta i} a^{\beta z l} \frac{2m'}{2p'q + q^2} + a^{x'\beta l} b^{\beta z i} \frac{2m}{2pq - q^2} \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_4 &= if^{ilj} b^{jx'\alpha} - (b^{x'\beta i} a^{\beta z l} - a^{x'\beta l} b^{\beta z i})\end{aligned}\quad (53)$$

$$\begin{aligned}\beta_6 &= (m-m') \left( \frac{1}{m_{K^*}^2} - \frac{1}{m_K^2} \right) \beta_8 \\ \frac{f_\pi}{\sqrt{2}} \beta_8 &= b^{x'\beta i} a^{\beta z l} \frac{2m'}{2p'q + q^2} - a^{x'\beta l} a^{\beta z i} \frac{2m}{2pq - q^2}\end{aligned}$$

Ha (49)–(50)-ben  $(p-p')^2 = 0$  esetet nézzük, s vetjük össze (52)–(53)-mal, az együttthatók, leszámítva a simasági konstansok korrekciós járulékát, vagy pontosan megegyeznek (1, 4, 5, 7, 8), vagy hasonló alakúak, csak még a mezonok csatolási állandóival és tömegeivel módosultak. (2, 3, 6) Eredményünk azon alapszik, hogy a hármas vertexek (32)–(33) alakjában a inverz-propagátoros tag szerepel. Míg lágy pionnál a pólusokkal csak az egyértelmű limes kikényszerítésével indokolt manővert kell végrehajtanunk, és az amplitúdóban a fizikai, illetve a  $q=0$  helyen vett különbségük jelenik meg, addig a kemény pion módszernél automatikusan adódik a helyes eredmény.



Megemlítjük még, hogy bizonyos közelítéseket alkalmazva  $\left(\frac{m_\pi}{m'} \approx 0, \frac{p'}{m'} \approx 0\right)$

és azzal a feltevéssel, hogy a kifejtési együtthatók körülbelül azonos nagyságrendűek, a simasági konstansok kiesnek a teljes szélesség számításából. Ezen a módon becsléseket végeztünk az egyes bomlásokra, az amplitúdók arányosak az  $\alpha = f^{ilj} a^{j\alpha'}$  és  $\beta = f^{ilj} b^{j\alpha'}$  kifejezésekkel. A formfaktorokra SU(3) szimmetriát tételezve fel, az  $\alpha$  és  $\beta$  könnyen számítható. Az így kapott elágazási arányok:

$\Lambda \rightarrow u\pi^+ l\nu$	$0,82 \cdot 10^{-10}$	$0,88 \cdot 10^{-10}$
$p\pi^0 l\nu$	$0,41 \cdot 10^{-10}$	$1,14 \cdot 10^{-10}$
$\Sigma^+ \rightarrow p\pi^+ l\nu$	$2,7 \cdot 10^{-8}$	$3,9 \cdot 10^{-8}$
$\Sigma^- \rightarrow u\pi^0 l\nu$	$2,8 \cdot 10^{-8}$	$7,8 \cdot 10^{-8}$
$\Xi^0 \rightarrow \Lambda\pi^+ l\nu$	$2,4 \cdot 10^{-9}$	$3,0 \cdot 10^{-9}$
$\Xi^- \rightarrow \Lambda\pi^0 l\nu$	$0,65 \cdot 10^{-9}$	$2,65 \cdot 10^{-9}$

A táblázat második oszlopa [7] lágy pionos módszeren alapuló pontosabb (géppel végzett) számításainak eredményét mutatja. Mint látjuk, a közelítő számítással kapott adatok ezekkel elég jól egyeznek, nem világos azonban, hogy [7]-ben az izomultipllett tagok szélességeinek fordított viszonya miért adódott.

#### A nemleptonos bomlások

Felmerült olyan elképzelés [8], hogy a hiperonok nemleptonos bomlásainak mátrixeleme a  $K(\mathcal{H}) + Y \rightarrow N + \pi$  szórás mátrixeleméből adódik, ha a  $K(\mathcal{H})$  impulzus zérushoz tart. Esetünkben ez a határérték egyszerűen zérus, kivéve, ha, mint [9]-ben a pionimpulzus négyzete  $q^2$  nincs a tömeghéjon (pl.  $q^2 \rightarrow 0$ ). E jelenség igen kérdésessé teszi a nemleptonos bomlások említett típusú leírását. Újabban számos dolgozat foglalkozott azzal a lehetőséggel, hogy az axiálvektor áramra a Ward-identitás csak módosított alakban érvényes [10], és például a  $\pi \rightarrow \gamma\gamma$  mátrixelem  $q^2 \rightarrow 0$  esetben nem zérus, ellentétben a PCAC összefüggésből adódó követelménnyel. Lehetséges, hogy itt is hasonló helyzettel állunk szemben, a kérdéssel más helyen foglalkozunk.

#### IRODALOM

1. Az idevágó számos dolgozat közül csak azokat említjük, amelyhez a jelen munka közvetlen kapcsolódik:

- S. Weinberg and H. J. Schnitzer, Phys. Rev. 164 1823 (1967)
- I. S. Gerstein and H. J. Schnitzer, Phys. Rev. 170 1638 (1968)
- I. S. Gerstein, H. J. Schnitzer and S. Weinberg Phys. Rev. 175 1873 (1968).
- I. S. Gerstein and H. J. Schnitzer, Phys. Rev. 175 1876 (1968).
- B. Renner, Breaking of the SU(3)  $\times$  SU(3) symmetry (Preprint)
- D. A. Wray, Preprint (1968) Oxford U. K.
- A. Pais and S. B. Treiman,  $\pi - A$  phase information (Preprint).
- Z. Kunszt and T. Nagy, Symposium on Hadron Spectroscopy, Keszthely 1968 (Preprint)
- Y. Singler, Phys. Rev. 161, 1497 (1967).
- S. Coleman and S. L. Glashow, Phys. Rev. 134 B, 671, (1964).
- Ming Chiang Li, Nuovo Cim. 53, 327 (1968).
- S. I. Adler Phys. Rev. 177 2426 (1969).
- J. S. Bell and R. Jackiw, CERN preprint (1968).
- I. S. Gerstein and R. Jackiw, Oxford preprint (1969)







# NITROGÉNKRIOSZTÁT NEUTRONSPEKTROSKÓPIAI MÉRÉSEKHEZ 80...300 K° HŐMÉRSÉKLET-TARTOMÁNYRA

BALLA JÁNOS

KFKI Szilárdtestfizikai Laboratórium

A laboratóriumban folyó neutronfizikai mérésekhez: virtuális spinhullám-gerjesztések híg mágneses ötvözetekben való vizsgálatához, folyadék-gáz korrelációs függvényeknek a kritikus pont környezetében történő vizsgálatához stb. nitrogén-kriosztátot építettünk. Ismertetjük a berendezés szerkezetét és működését, az előzetes hőtani számítás menetét és a hőátviteli folyamatok számolására kidolgozott függvény-grafikonokat, továbbá a kriosztát használata közben nyert tapasztalatainkat.

## A kriosztát szerkezete és működése

A kriosztát a neutronspektrométer egyik önálló egysége. Mintakamrájában egymástól eltérő méretű és anyagú minták elhelyezésére és lehűtésére van lehetőség; így a néhány köbcentiméter térfogatú por-mintáktól kezdve a nagy felületű ( $9 \times 9 \text{ cm}^2$ ) és nagy térfogatú ( $81 \text{ cm}^3$ ) síktargetekig. A hőmérséklet szabályozási tartománya a folyékony nitrogén forráspontjától szobahőmérsékletig terjed, de a folyadékfürdő levákuumozásával a normál forráspont alatti tartomány is előállítható.

A kriosztát konstrukciójánál és szerkezeti anyagainak megválasztásánál az alábbi fő szempontokat kellett figyelembe vennünk:

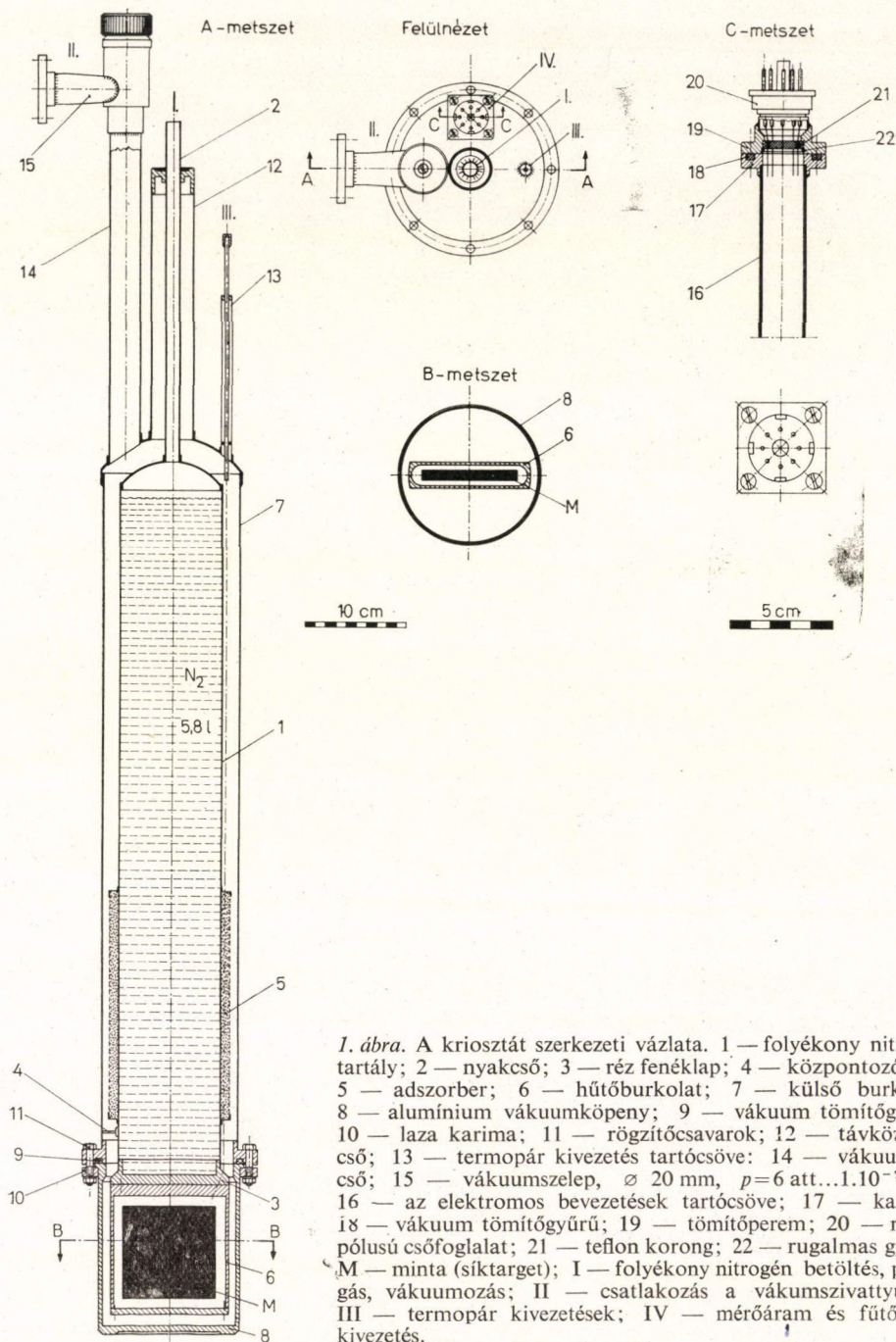
a) A mintán a megfelelő sebességű (hullámhosszú) neutronok egy része rugalmatlanul szóródik, vagyis megváltozik a sebessége. Az idézett méréseknél kb.  $1000 \text{ msec}^{-1}$  sebességű (hullámhossz:  $\lambda \sim 4 \text{ Å}$ ) ún. hideg neutronokat használunk. A zavaró, nem a mintából eredő háttér lecsökkentése céljából a neutronnyaláb útjába a mintán kívül csak minimális anyagmennyiség kerülhet. Ennek érdekében a minta környezetében levő határoló felületek (külső vákuumköpeny, hűtőburkolat, mintatartó) falvastagságát a lehetséges legkisebb értékre kell megválasztanunk.

b) A neutronok az útjukban levő határoló felületeken bizonyos — a fal anyagától függő — mértékben abszorbeálódnak és szóródnak. Ezeket az anyagokat tehát úgy kell megválasztani, hogy az abszorpciós és a szórási hatáskeresztmetszet minél kisebb legyen. Ezt a követelményt egyéb kedvező tulajdonságai mellett a tiszta (99,99%-os) alumínium elégíti ki.

c) A kriosztát elpárologtató-rendszerű. A minta és a hűtőközeg közötti hőátvitelt olyan szerkezeti megoldásokkal kell megvalósítani, amelyek adott minta-hőmérséklet mellett a legkisebb hűtőközeg-felhasználást eredményezik.

d) A szórási spektrum felvétele hosszabb időt igényel. A választott minta-elrendezés és hőátviteli mód mellett a minta beállított hőmérsékletének a spektrum felvétele alatt változatlanul kell maradni. A minta — mintatartó — hőközlő egységet tehát egy hőmérsékletszabályozó rendszer szabályozott szakaszának kell







tekinteni, és meg kell vizsgálni szabályozási eltérés, valamint stabilitás szempontjából.

e) A kriosztát szerkezete egyszerű, könnyen elkészíthető legyen. Biztosítsa a hőszigetelő vákuum sztatikus fenntartását, továbbá a mintacsere, illetve a meghibásodások elhárításának gyors elvégzését.

f) A folyékony nitrogén tartály nagysága hűtőközeg utántöltés nélkül 24 órás folyamatos mérést tegyen lehetővé.

g) A kriosztát geometriai méretei több meglevő mérőberendezésnél és az adott külső reaktor védelemnél való használatot biztosítsák.

A kriosztát léptékhelyes szerkezeti vázlatát az 1. ábrán mutatjuk be. A sárgarézt lemezből készített 5,8 l űrtartalmú folyékony nitrogén tartály (1) felső részét  $\varnothing 15 \times 1$  mm méretű rozsdamentes acél nyakcső (2) köti össze a szobahőmérsékletű környezettel. A folyadéktartály réz fenéklapjának (3) alsó felületét a jó konduktív hőátvitel érdekében finoman megmunkáltuk. A folyadéktartály központosítását és a körgyűrű alakú hőszigetelő hézag centrikusságát  $120^\circ$ -os osztással elhelyezett 3 db kis keresztmetszetű ( $\varnothing 2 \times 0,2$  mm, hosszúság 10 mm) rozsdamentes acélcső (4) biztosítja. A hűtőközeg tartály alsó részén sárgarézt szitaszövet burkolatban helyezkedik el az AG-2 márkájú aktív szén adszorber (5). A szén térfogata kb.  $0,6 \text{ dm}^3$ , adszorpciós kapacitása teljes telítődésig kb. 30 N lit levegő. A belső hideg-zóna alsó tagja a folyadéktartály fenéklapjára csavarozott alumínium hűtőburkolat (6), amelynek fedelét a minta (M) elhelyezésénél (mintacserénél) könnyen és gyorsan eltávolíthatjuk. A hűtőburkolat falvastagsága a neutronok útjába eső függőleges sík felületeknél 1,5 mm. Hengeres mintatartó alkalmazása esetén hengeres alakú hűtőburkolatot használunk.

A kriosztát külső köpenyét (7) újezüst lemezből készítettük, átmérője 132 mm. A külső köpeny alsó sárgarézt pereméhez (átmérője 168 mm) illeszkedik a leszerelhető alumínium vákuumköpeny (8), amelynek falvastagsága a neutronnyaláb útjába eső részeken csak 2 mm. Tömítésére kör keresztmetszetű kereskedelmi vákuum-tömítőgyűrűt (9), rögzítésére laza karimát (10) és hatlapú csavarokat (11) használunk.

A kriosztát felső részén a kivezetések láthatók. A nyakcső (2) rögzítésére a távköztartó cső (12) felső végéhez forrasztott menetes közdarab szolgál, amely a belső hideg-zóna súlyát is viseli. A réz-konstantán termopárok kivezetését a (13) jelű cső rögzíti. A vákuumozó cső (14) felső végére forrasztottuk a vákuumszelepet (15), amelynek mértékadó átmérője a tömítőfelületnél 20 mm. A mérőáramok és a fűtőáram bevezetésére a (16) ... (22) alkatrészekből álló nyolcpólusú vákuumátvezető szolgál. Ennek bontható felső részét fémköpenyű elektroncső foglalataból alakítottuk ki. Maximálisan megengedett áramerősség tartós terhelésnél 1 A, rövid csúcsterhelésnél 2 A; maximálisan megengedett feszültség tartós terhelésnél 500 V, rövid csúcsterhelésnél 1000 V.

A kriosztát fém alkatrészeinek kötésére kemény-, illetve lágyforrasztást alkalmaztunk, a termopárok kivezetését araldit ragasztással tömítettük. A berendezés szerkezeti hossza vákuumszeleppel együtt 1280 mm, legnagyobb átmérője 168 mm. E méretek minden tekintetben megfelelnek a g) szerinti követelményeknek.

A minta elrendezését és a hőátvitel módját a kívánt mintahőmérséklet szerint választjuk meg:

1. A folyékony nitrogén forráspontja körüli mintahőmérsékleteknél az alumínium mintatartót — illetve közvetlenül a mintát — jó hőkontaktusba hozzuk



az alumínium hűtőburkolat felső vízszintes lapjával. Ebben az esetben a hőátvitel két úton jön létre: a felfekvő felületeknél hővezetéssel, a vákuumtérben egymástól bizonyos távolságban levő felületek között pedig sugárzással. Ilyen elrendezésnél a minta hőmérséklete kb.  $0,5...1\text{ K}^\circ$ -kal nagyobb a folyékony nitrogén hőmérsékleténél.

2. A folyékony nitrogén hőmérsékleténél lényegesen nagyobb ( $\Delta T > 10\text{ K}^\circ$ ) mintahőmérsékletek előállítása érdekében a mintatartó és a hűtőburkolat közötti fémes kontaktust megszüntetjük. A vékony rozsdamentes acélsövekekkel ( $\varnothing 1,5 \times 0,2\text{ mm}$ ) a hűtőburkolaton belüli vákuumtérben szimmetrikusan rögzített mintatartóra tekercselt fűtőtekercs fűtőáramát elektronikus szabályozóval [1] a kívánt értékre szabályozzuk. A hőátvitel egyetlen lehetséges módja az alumínium felületek közötti hőszugárzás. A sugárzásos hőközléssel viszonylag kicsiny fűtőteltjesítmények mellett a minta hőmérsékletének jelentős emelkedését lehet elérni. A hőmérsékletszabályozót PD üzemmódban használjuk, a minta tömegétől függően 400 W-os vagy 50 W-os végfokozattal.

A hideg-zóna és a külső környezet közötti hőátvitel alacsony szinten tartása érdekében a hőhidakat képező rozsdamentes acélső átvezetéseknel (2), (4) kicsiny hővezető keresztmetszetről és nagy hővezetési hosszról gondoskodtunk. A vákuumköpenyben uralkodó nyomást  $5 \cdot 10^{-4}\text{ tor}$ -nál kisebb értéken tartva kicsiny a maradék gáz (levegő) hővezetése. A szembenálló koncentrikus hengerfelületek közötti hőszugárzás csökkentésére a felületek emissziós tényezőjét polírozással csökkentettük.

A kriosztát részegységeit, majd a kész kriosztátot hűtési próba és hermetikusági vizsgálat után vákuum-lyukkeresővel ellenőriztük. Ezek eredményeként a berendezés egyszeri vákuumozás után hideg állapotban  $1 \cdot 10^{-5}...5 \cdot 10^{-5}\text{ tor}$  statikus vákuumértékek megtartására alkalmas. Vákuumozás közben az aktív szenet infralámpákkal kb.  $+150\text{ C}^\circ$ -ig felmelegítjük.

### A kriosztát hőtani számítása

Az előzetes hőtani számítás célja a párolgási veszteség várható értékének megállapítása és a befolyásoló tényezők hatásának vizsgálata.

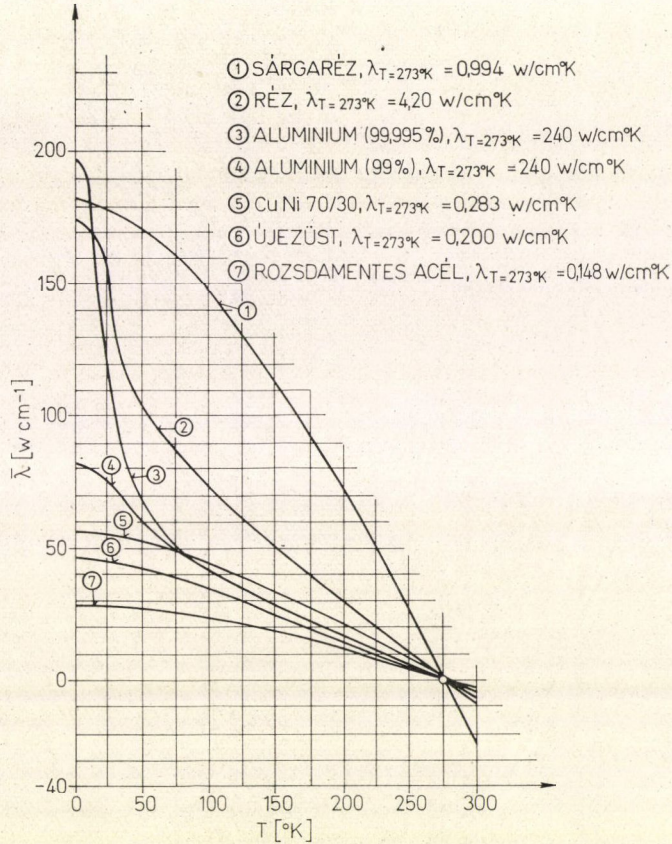
A kriosztát párolgási alapveszteségét alapvetően három hőátviteli lehetőség szabja meg: a folyékony nitrogén tartály nyakcsövének és az elektromos csatlakozások hővezetése, a vákuumtérben levő maradék gáz hővezetése, és a különböző hőmérsékletű falak közötti hőszugárzás. E hatások révén létrejött hőáramok számításának módszereit korábbi munkánkban [2] ismertettük. Most a hőáramok gyors meghatározásának lehetőségeit tárgyaljuk, a kidolgozott függvénygrafikonok segítségével.

#### a) A hőhidak hővezetése.

Az  $l[\text{cm}]$  hosszúságú  $A_0[\text{cm}^2]$  hővezető keresztmetszetű alkatrész hidegebb végének  $T_1[\text{K}^\circ]$ , a melegebb végének pedig  $T_2[\text{K}^\circ]$  a hőmérséklete. A hővezető alkatrész anyagának hővezetési tényezője a hőmérséklet függvénye,  $\lambda = f(T)$ ; a hővezetési tényező tehát az alkatrész  $l$  hossza mentén folyamatosan változik. A  $\lambda(T)[\text{wcm}^{-1}\text{ K}^{-1}]$  hővezetési tényező értékét különböző szerkezeti anyagokra  $4,2...300\text{ K}^\circ$  hőmérséklet-tartományban logaritmusos léptékű függvénydiagramok



2. ábra. Kriosztátok szerkezeti anyagaként alkalmazott fémek és ötvözetek integrált hővezetési tényezője 4,2...300 K° hőmérséklet-tartományban



tartalmazzák [3]. Ezekből a hővezetési tényező integrált értékét

$$\bar{\lambda} = \int_{T_1}^{T_2} \lambda(T) dT \quad [\text{w cm}^{-1}] \quad (1)$$

összefüggéssel számolhatjuk.

Az integrált érték ismeretében az adott hővezető alkatrészén vezetéssel beszivárgó hőáramot a

$$\dot{Q}_v = \frac{A_0}{l} \bar{\lambda} \quad [\text{w}] \quad (2)$$

kifejezéssel határozzuk meg.

A hővezetési tényező  $\bar{\lambda}$  [ $\text{w cm}^{-1}$ ] integrált értékét a 2. ábrán látható függvénygrafikonokból vehetjük, amelyeket a [3] szerinti logaritmikus diagramok lineáris léptékbe történt ábrázolása után azok grafikus integrálásával nyertünk.\*

\* Integrálásnál a teljes hőmérséklettartományban a  $T=273 \text{ K}^\circ$  értéket határértéknek vettük fel:  $T_1=0...273 \text{ K}^\circ$ , tartományban  $T_2=273 \text{ K}^\circ$ ,  $T_2=273...300 \text{ K}^\circ$  tartományban  $T_1=273 \text{ K}^\circ$ . A határok felcserélése miatt  $T_1=273 \text{ K}^\circ$  esetben az integrál negatív előjelű, a diagram a  $\bar{\lambda}$  tényező  $(-1)$ -szeresét ábrázolja.



## b) A maradék gáz hővezetése

A  $T_1$  és  $T_2$  hőmérsékletű ( $T_1 < T_2$ ) falak között a hő szállítását a maradék gáz molekulái végzik: a  $T_2$  hőmérsékletű falon ütköző molekulák energiát vesznek fel, és a felvett energiát — ha a molekulák egymáshoz való ütközésétől eltekintünk — a  $T_1$  hőmérsékletű falon adják le. Ütközéskor a molekulák véges ideig a falon tartózkodnak, és azzal igyekeznek energetikai egyensúlyba jutni.

1. Abban az esetben, amikor a maradék gáz nyomása kicsiny és így a gázmolekulák szabad úthossza nagyobb a vákuumteret határoló koncentrikus hengerfalak közötti távolságnál, a maradék gáz hővezetésével szállított  $\dot{Q}_G$  [w] hőáramot a hőáramsűrűsége felírt

$$\dot{q}_G = \frac{\dot{Q}_G}{\alpha_0 A_1} = 0,2426 \frac{k+1}{k-1} \frac{p}{\sqrt{MT}} (T_2 - T_1) \quad [\text{w cm}^{-2}] \quad (3)$$

összefüggés segítségével tudjuk meghatározni [4].

Jelölések:

- $A_1$  [cm<sup>2</sup>] a belső tartály felülete;
- $A_2$  [cm<sup>2</sup>] a külső tartály felülete;
- $\alpha_1$  a belső tartály anyagától, felületétől és hőmérsékletétől függő akkomodációs tényező;
- $\alpha_2$  a külső tartály anyagától, felületétől és hőmérsékletétől függő akkomodációs tényező;
- $T_1$  [K°] a belső tartály hőmérséklete;
- $T_2$  [K°] a külső tartály hőmérséklete;
- $p$  [tor] a vákuumnyomás;
- $T$  [K°] a nyomásmérő műszer hőmérséklete (általában  $T \cong T_2$ );
- $M$  a maradék gáz mólsúlya;
- $k = \frac{C_P}{C_V}$  a fajhőviszony, és a teljes akkomodációs tényező

$$\alpha_0 = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 + \frac{A_1}{A_2} (1 - \alpha_2) \alpha_1} \quad (4)$$

Levegőre vonatkozóan  $\alpha_1 = 1$  és  $\alpha_2 = 0,8 \dots 0,9$  között változik. Az akkomodációs tényezők értékének meghatározására Knudsen az alábbi egyenletet adta:

$$\alpha = \frac{T_E - T_V}{T_E - T_F} \quad (5)$$

amelyben

- $T_E$  [K°] a molekula belső energiáját kifejező hőmérséklet ütközés előtt,
- $T_V$  [K°] a molekula belső energiáját kifejező hőmérséklet ütközés után,
- $T_F$  [K°] a fal hőmérséklete.

Ha  $T_V = T_F$ ,  $\alpha = 1$ ; ez azt jelenti, hogy a falba ütköző molekulák és a fal között termikus egyensúly áll fenn.

A (3) egyenlet nagyvákuum tartományban jól szemlélteti a maradék gáz  $p$  nyomásának befolyását az energiaszállításra.  $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ ,  $A_1 = A_2 = 1$ ,  $T_1 = 77$  K°,  $T_2 = 300$  K°,  $T = 295$  K° értékek helyettesítésével levegőre vonatkozóan ( $M = 28,96$ ;



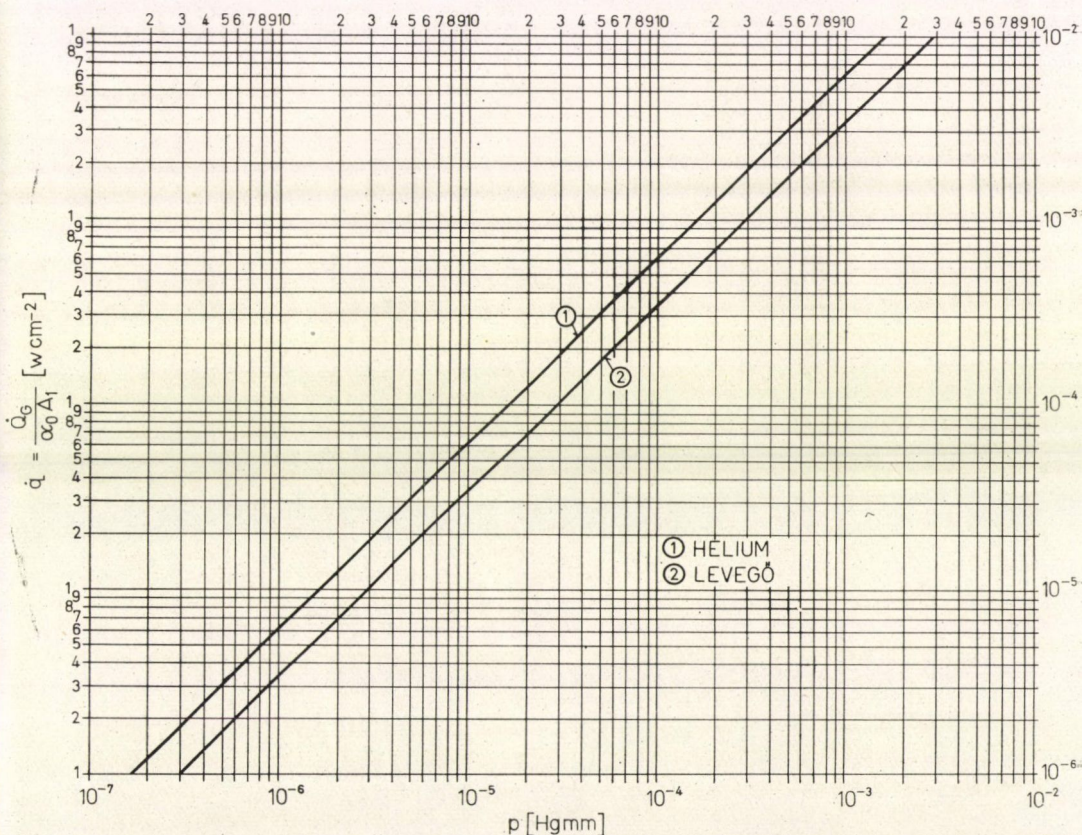
$C_p = 0,24 \text{ Kcal kg}^{-1} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1}$ ;  $C_v = 0,172 \text{ Kcal kg}^{-1} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1}$ ;  $k = 1,395$ )  $p$  különböző értékeinél kiszámoltuk a  $\dot{q}_G$  hőáramsűrűséget. Az eredményt a 3. ábrán látható grafikonon ábrázolja, amelynek segítségével adott  $p$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $\alpha_1$  és  $\alpha_2$  értékek esetén a maradék gáz vezetésével létrejött hőáramot könnyen és gyorsan meghatározhatjuk.

A 3. ábrába a hélium gázra vonatkozó grafikont is berajzoltuk — tekintettel a héliumnak az alacsony hőmérsékletek fizikájában elfoglalt igen fontos szerepére. A maradék gázok hővezetésével szállított hő mennyiségének meghatározására szolgáló további módszer [5]-ben található.

2. Abban az esetben, amikor a hőszigetelő térben uralkodó nyomás közel atmoszferikus, a hővezetéssel szállított hőáramot hengerszimmetrikus elrendezés-nél a

$$\dot{Q}'_G = L \frac{2\pi}{\ln \frac{R_2}{R_1}} \lambda \quad [\text{w}] \quad (6)$$

kifejezéssel számolhatjuk.



3. ábra. A maradék gázok által fenntartott hőáramsűrűség  $p = 1 \cdot 10^{-7} \dots 3 \cdot 10^{-3}$  tor nyomások között  $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ ,  $A_1 = A_2 = 1$ ,  $T_1 = 77 \text{ K}^\circ$ ,  $T_2 = 300 \text{ K}^\circ$  és  $T = 295 \text{ K}^\circ$  esetén



Jelölések:

$L$  [cm] a henger hosszúsága,

$R_1$  [cm] a belső henger sugara,

$R_2$  [cm] a külső henger sugara,

$\bar{\lambda}$  [w cm<sup>-1</sup>] a hővezetési tényező integrált értéke.

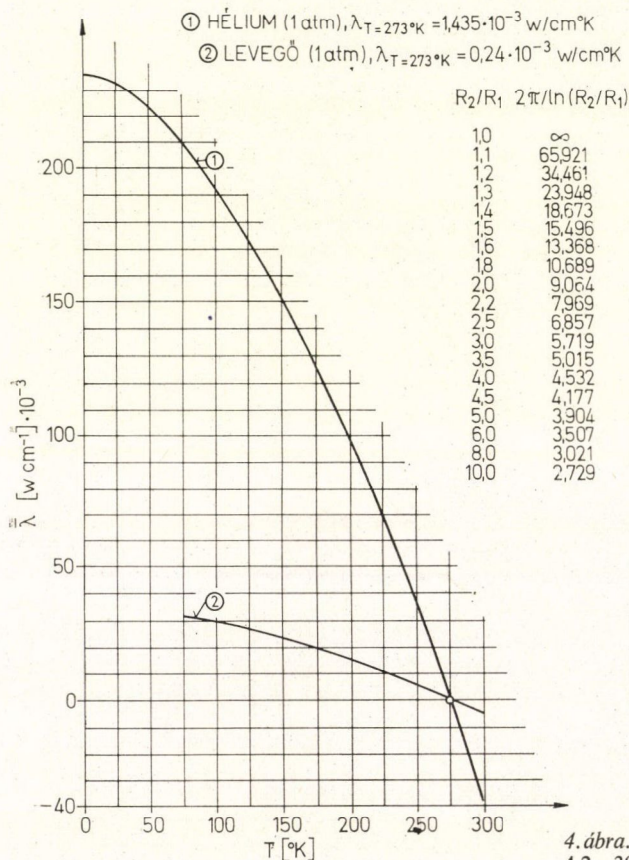
A  $\bar{\lambda}$  hővezetési tényező számszerű értékeit a 4. ábrán bemutatott függvénygrafikonból nyerjük, amelyet az atmoszferikus nyomású levegő és hélium [3] szerinti lineáris léptékű  $\lambda(T) - T$  diagramjának grafikus integrálásával konstruáltunk.

c) A sugárzásos hőátvitel

A koncentrikus hengerfelületek között sugárzással fellépő  $\dot{Q}_s$  [w] hőáramot a hőáramsűrűsége felírt

$$\dot{q}_s = \frac{\dot{Q}_s}{A_1} = \sigma \frac{1}{\left(\frac{1}{\varepsilon_1}\right) + \left(\frac{A_1}{A_2}\right) \left[\left(\frac{1}{\varepsilon_2}\right) - 1\right]} (T_2^4 - T_1^4) \quad [\text{w cm}^{-2}] \quad (7)$$

egyenletből lehet meghatározni [6].



Jelölések:

$A_1$  [cm<sup>2</sup>] a belső tartály felülete,

$A_2$  [cm<sup>2</sup>] a külső tartály felülete,

$\varepsilon_1$  a belső tartály felületét jellemző emissziós tényező,

$\varepsilon_2$  a külső tartály felületét jellemző emissziós tényező,

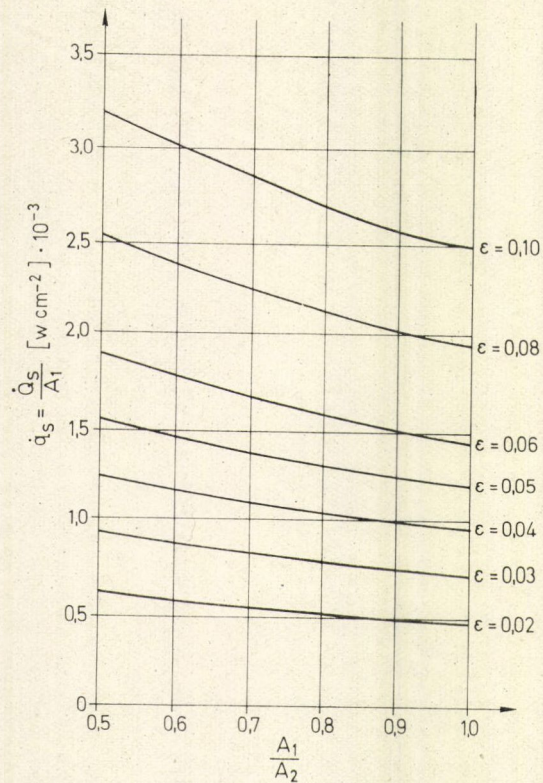
$T_1$  [K°] és  $T_2$  [K°] már ismertek,

$\sigma = 5,77 \cdot 10^{-12}$  [w cm<sup>-2</sup> K<sup>-4</sup>] a Stefan—Boltzmann sugárzási tényező.

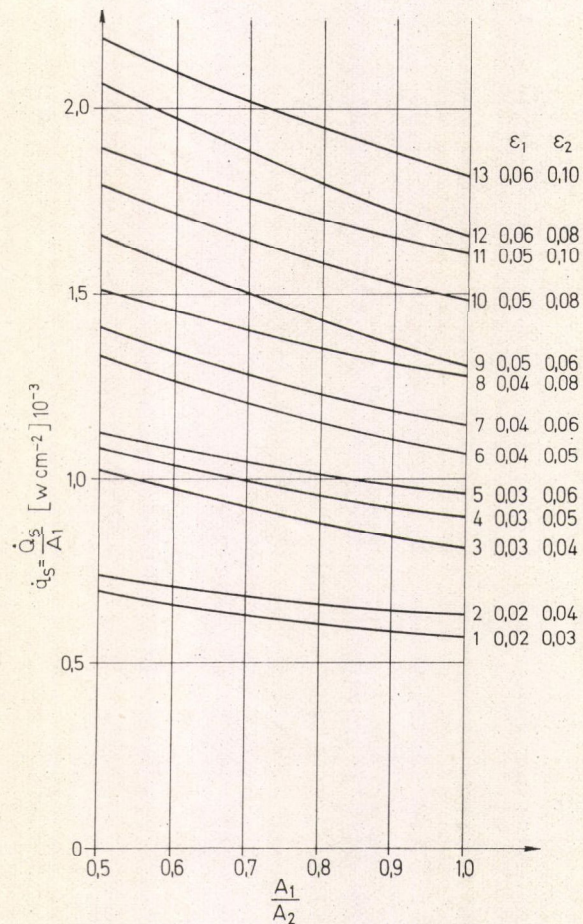
$\dot{q}_s$  számszerű meghatározásának megkönnyítésére  $T_1 = 77$  K°,  $T_2 = 300$  K°,  $A_1/A_2 = 0,5 \dots 1$  értékek helyettesítésével  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$  és  $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$  esetekre kiszámoltuk a (7) egyenletet. A függvénygrafikonokat az 5. és a 6. ábra tartalmazza, a paraméter az emissziós tényező.

4. ábra. Gázok integrált hővezetési tényezője 4,2...300 K° hőmérséklet-tartományban





5. ábra. A sugárzással fenntartott hőáramsűrűség  
 $T_1 = 77 \text{ K}^\circ$ ,  $T_2 = 300 \text{ K}^\circ$ ,  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$  esetén



6. ábra. A sugárzással fenntartott hőáramsűrűség  
 $T_1 = 77 \text{ K}^\circ$ ,  $T_2 = 300 \text{ K}^\circ$ ,  $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$  esetén



Az  $\varepsilon$  emissziós tényezőnek az alacsony hőmérsékletű tartományban alkalmazott szerkezeti anyagokra és felületi minőségekre vonatkozó értékeit [6]-ban találhatjuk.

d) A párolgási veszteség meghatározása

A kriosztát párolgási veszteségét 24 óra időtartamra vonatkozóan a bemutatott függvénygrafikonok segítségével számoljuk. A  $T_2$  hőmérsékletű környezetből beáramló hő összes mennyisége

$$Q_{2-1} = \sum \dot{Q}_{V-S} \cdot 24 \cdot 3,6 \cdot 10^3 [\text{ws}] \quad (8)$$

A  $Q_{2-1}$  hőmennyiséget [kcal] mértékegységbe kell átszámolnunk

$$Q_{2-1} [\text{kcal}] = \frac{Q_{2-1} [\text{ws}]}{4,1868 \cdot 10^3}, \text{ ugyanis: } 1 \text{ kcal} = 4,1868 \cdot 10^3 \text{ Joule.}$$

Az elpárolgó folyadékból keletkezett gáz mennyisége

$$V_{N_2G} [\text{Nm}^3] = \frac{Q_{2-1} [\text{Kcal}]}{r [\text{Kcal}/\text{Nm}^3]}, \quad (9)$$

ahol  $r = 59,6 \text{ Kcal}/\text{Nm}^3$ , a nitrogén párolgáshője. Az elpárolgott folyadék mennyisége:

$$V_{N_2F} = 1,539 V_{N_2G} [1/24 \text{ h}], \quad (10)$$

mert 1,539 1 normál állapotú folyékony nitrogénből 1  $\text{Nm}^3$  gáz keletkezik.

A (8) összefüggésben szereplő hőáramok:

1. A hőhidakon keresztül befolyó hőáramok közül a nyakcsövön és az elektromos vezetékeken létrejövőt számoljuk. Elhanyagoljuk a folyékony nitrogén tartály kitámasztásai és a termopár kivezetésének hőbevezetését.

A nyakcső jellemző adatai:

$A_0 = 0,45 \text{ cm}^2$  a hővezető keresztmetszet;

$l = 26 \text{ cm}$  a hővezető-hossz;

anyaga rozsdamentes acél, amelynek  $T_1$  és  $T_2$  hőmérsékletek közötti integrált hővezetési tényezője a 2. ábra 7-es jelű görbéjéből

$$\bar{\lambda} = \bar{\lambda}_1 - \bar{\lambda}_2 = 24,5 - (-3,5) = 28 \text{ w cm}^{-1}$$

A nyakcsövön bevezetett hőáram a (2) egyenlet szerint

$$\dot{Q}'_V = \frac{A_0}{l} \bar{\lambda} = 0,485 \text{ W.}$$

Az elektromos bevezetések jellemzői:

$A_0 = 1,2 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2$ ,  $l = 20 \text{ cm}$ , a réz vezetékek integrált hővezetési tényezője a 2. ábra 2-es jelű görbéje szerint  $\bar{\lambda} = 95 \text{ w cm}^{-1}$ .

Az elektromos vezetékeken létrejövő hőáram értéke a (2) egyenlettel:  $\dot{Q}''_V = 0,057 \text{ W}$ . A hőhidakon bevezetett hőáram tehát:

$$\dot{Q}_V = \dot{Q}'_V + \dot{Q}''_V = 0,552 \text{ W.}$$

2. A hőszigetelő vákuumköpenyben maradt levegő hővezetésével  $p = 4 \cdot 10^{-4} \text{ Hg mm}$  vákuumnyomás mellett beáramló hőáramot a 3. ábra 2-es jelű görbéje segítségével kapott  $\dot{q}_G = 1,4 \cdot 10^{-3} \text{ w cm}^{-2}$  hőáramsűrűség ismeretében a (3) összefüggéssel határozzuk meg:

$$\dot{Q}_G = \dot{q}_G \alpha_0 A_1 [\text{w}],$$



ahol  $A_1 = 3020 \text{ cm}^2$  a nitrogén tartály külső felülete, és  $\alpha_0$  a teljes akkomodációs tényező.

$\alpha_0$  értékét  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = 0,85$  és  $A_2 = 3855 \text{ cm}^2$  helyettesítésével a (4) egyenlettel számoljuk:  $\alpha_0 = 0,895$ .

A maradék gáz hővezetésével létrejövő hőáram  $\dot{Q}_G = 3,78 \text{ W}$ .

Megjegyezzük, hogy a kriosztát vákuumterét a mintacseréket követő használat előtt kétfokozatú elővákuumszivattyúval  $2 \cdot 10^{-2}$  tor nyomásig légtelenítettük. A kriosztáton levő (15) vákuumszelep elzárása után a folyékony nitrogén hőmérsékletére lehűlt aktív szén adszorber a vákuumnyomást  $3 \cdot 10^{-4} \dots 5 \cdot 10^{-4}$  tor értékekig javította. Ezért  $\dot{Q}_G$  számolásnál a vákuumnyomás közepes nagyságát vettük figyelembe.

A vákuum leromlása (a vákuumköpeny levegőzése) esetén fellépő hőáramot a (6) összefüggéssel lehet meghatározni. Adatok:  $L = 70 \text{ cm}$ ,  $R_2 = 6,5 \text{ cm}$ ,  $R_1 = 5 \text{ cm}$ ,  $\ln R_2/R_1 = 23,948$  és  $\bar{\lambda} = \bar{\lambda}_1 - \bar{\lambda}_2 = 30 - (-3) = 33 \text{ w cm}^{-1}$  (l. a 4. ábra 2-es jelű görbáját).

Fenti adatokat helyettesítve  $\dot{Q}'_G = 606 \text{ W}$  és  $\dot{Q}'_G/\dot{Q}_G = 638$ .

3. A sugárzással létrejövő hőáramot a (7) egyenletből fejezzük ki:

$$\dot{Q}_S = A_1 \dot{q}_S \quad [\text{W}]$$

A folyékony nitrogén tartály  $A_1$  felülete már ismert; a hőáramsűrűség értékét  $A_1/A_2 = 0,784$ ,  $\varepsilon_1 = 0,03$ ,  $\varepsilon_2 = 0,04$  esetre a 6. ábra 3-as jelű görbájából kapjuk:  $\dot{q}_S = 0,892 \cdot 10^{-3} \text{ w cm}^{-2}$ .

A fenti értékek helyettesítésével  $\dot{Q}_S = 2,7 \text{ W}$ .

A hőáramok összege

$$\sum \dot{Q}_{V-S} = \dot{Q}_V + \dot{Q}_G + \dot{Q}_S = 7,03 \text{ W}.$$

A  $T_2$  környezetből 24 óra alatt beáramló hőmennyiség (8) összefüggés szerinti értéke:  $Q_{2-1} = 60,8 \cdot 10^4 \text{ ws} = 145 \text{ Kcal}$ .

A keletkezett gáz térfogata a (9) egyenlettel:  $V_{N_2G} = 2,43 \text{ Nm}^3$ .

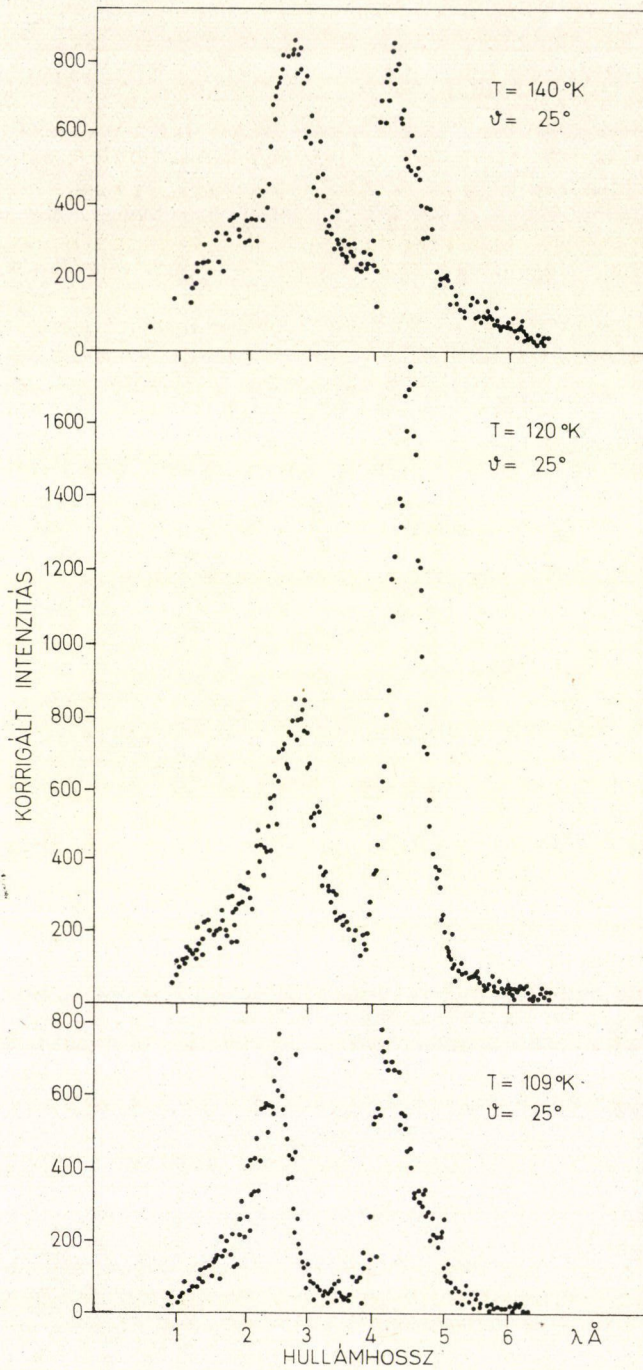
Az elpárolgott folyékony nitrogén térfogata a (10) összefüggés szerint:  $V_{N_2F} = 3,74 \text{ l}/24 \text{ óra}$ , illetve  $0,156 \text{ l/h}$ .

### A kriosztát használatának tapasztalatai

A kriosztátot több éves használat alatt különböző neutron-spektrométereknél egymástól erősen eltérő mérési feladatokra alkalmaztuk. Ezek közül az etiléter folyadék-gáz korrelációs függvények vizsgálata a kritikus pont környezetében [7], továbbá a virtuális spinhullám-gerjesztések kísérleti vizsgálata híg mágneses ötvözetekben [8] különösen szigorú követelményeket támasztottak a kriosztát szerkezetével, a hőközlési módokkal és a biztonságos működéssel kapcsolatban. A berendezés használhatóságának illusztrálására a 7. ábrán példaképpen az utóbbi mérések keretében az antiferromágneses mangánoxidon  $\vartheta = 25^\circ$  szórási szög alatt rugalmasan és rugalmatlanul szórt hideg neutronok  $T < T_N$ ,  $T \sim T_N$  és  $T > T_N$  esetekben felvett hullámhossz-spektrumát mutatjuk be.

A kriosztát vákuumköpenyét első használat előtt diffúziós szivattyúval hosszabb időn (70 óra) keresztül meleg állapotban  $5 \cdot 10^{-5}$  tor-ig vákuumoztuk. A szivattyúzás





7. ábra. Antiferromágneses mangánoxidon (MnO)  $\vartheta=25^{\circ}$  szórési szög alatt (rugalmasan és rugalmatlanul) szórt hideg neutronok hullámhossz-spektruma  $T < T_N$ ,  $T \sim T_N$  és  $T > T_N$  esetén. ( $T_N$  a Néel-hőmérséklet)



alatt a fém falakat és az aktív szén adszorbert infralámpákkal  $+150\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ig felmelegítettük. A kriosztáton levő vákuumszelep zárása után a hőszigetelő tér vákuuma sztatikus körülmények között több hónapos folyamatos használatot tesz lehetővé.

Mintacsere alkalmával ürítjük a nitrogén tartályt, majd a szobahőmérsékletre melegedett berendezés vákuumköpenyét a szelep lassú nyitásával levelegőzzük. A mintacsre elvégzése utáni vákuumozást elegendő kétfokozatú elővákuumszivattyúval elvégezni.

A leírt módon működtetett berendezés átlagos párolgási vesztesége a minta fűtése nélkül 3,9 l folyékony nitrogén 24 óránként, tehát 0,162 l/h. Ez azt jelenti, hogy a berendezés cseppfolyós nitrogén utántöltés nélkül 35–36 órás folyamatos működésre alkalmas. A nitrogén normál forráspontja feletti hőmérsékletek előállítására bevezetett fűtőteljesítmény értékét — és ezzel a többlet párolgási veszteséget — a minta tömege, fajhője, a hőközlési mód és a kívánt mintahőmérséklet határozták meg. Szobahőmérséklethez közeli mintahőmérsékletek előállításakor fellépő párolgási veszteségeknél a folyékony nitrogén tartályt 24 óránként egy-két esetben kellett utántöltenünk.

A párolgási veszteség számolt és mért értékének összehasonlítása az előzetes hőtani számításra bemutatott módszer helyességét bizonyítja. A számolt érték  $-4\%$ -os eltérése a hőáramok meghatározásánál történt elhanyagolások, továbbá az emissziós tényezők felvételénél fennálló bizonytalanságok következménye.

A hűtött minták hőmérséklet-homogenitásának biztosítása a hűtőburkolat homogén hőmérséklet-terében rögzített mintánál is egyedi megítélést, szerkezeti megoldást és előzetes ellenőrző méréseket kívánt. A kritikus állapotban vagy annak környezetében levő folyadék-gáz rendszereknél a jó hőátadási viszonyok miatt a homogén hőmérséklet elérése nem jelent problémát. Hengeres alakú ( $\varnothing 10\ldots 20\text{ mm}$ , hosszúság  $40\ldots 80\text{ mm}$ ) vékony falú alumínium mintatartóban — amelyet hengeres alakú hűtőburkolat vesz körül — elhelyezett por-minták esetében tapasztalataink szerint a tengelyirányú és a sugárirányú hőmérséklet-inhomogenitás legnagyobb értéke egyaránt  $0,1\ldots 0,2\text{ K}^{\circ}/\text{cm}$  között változott. Nagy felületű, vastag, rossz hővezető anyagú targeteknél az inhomogenitás kívánt szint alatt tartása érdekében a hőmérséklet megváltoztatása után hosszabb a beállási idő.

A minta hőmérsékletét mérő termopárt — esetenként megfelelő alumínium foglalatba ágyazva — a mintával jó hőkontaktusba hoztuk. Az elektronikus szabályozó vezérlésére szolgáló termopárt a fűtőtekercs környezetében a mintatartón helyeztük el. Ily módon a minta hőmérsékletének pontos regisztrálása mellett a szabályozott szakasz kicsiny időállandóját is biztosítottuk. A leírt mintatartó és termopár elrendezések az alkalmazott mintákkal szabályozástechnikai szempontból (szabályozási eltérés, stabilitás) a teljes szabályozási tartományban megfeleltek. A kriosztát eddigi használata folyamán működését akadályozó rendellenesség nem fordult elő.

### *Köszönetnyilvánítás*

*Pintér Attila és Pozsgai Gyula* munkatársaimnak a berendezés elkészítésében és bemérésében kifejtett gondos munkájukért, *Kroó Norbert* és *Bata Lajos* fizikusoknak a kriosztát alkalmazása közben nyert tapasztalatok átadásáért ezúton fejezem ki köszönetemet.



## IRODALOM

1. Balla J., Tompa K., Tóth F., Mérés és Automatika, 10., 1966.
2. Balla J., Magyar Fizikai Folyóirat, 4., 1967.
3. V. J. Johnson: Properties of Materials at Low Temperature, A. Compendium, New York 1961.
4. V. G. Fasztovszkij, J. V. Petrovszkij, A. E. Rovinszkij: Kriogennaja Tyehnika, Moszkva 1967.
5. Horváth M.: A vegyipari hidegtechnológia alapjai, Budapest, 1963.
6. Scott R. B.: Cryogenic Engineering, Boulder, Colorado 1959.
7. Bata L., Kandidátusi értekezés 1967.
8. Kroó N., Doktori értekezés 1969.



# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## A MÁGNESES ELEKTRON KVANTUMMECHANIKÁJÁRÓL\*

W. PAULI

Megmutatjuk, hogyan fogalmazható meg a mágneses elektron kvantummechanikája a sajátfüggvények Schrödinger-féle módszere szerint kétértékű függvények bevezetése nélkül. A Dirac—Jordan-féle általános transzformáció-elméletre támaszkodva minden egyes elektron helykoordinátái mellett — a rotációs szabadsági fok tekintetbe vétele céljából — mint további független változót bevezetjük a sajátimpulzusmomentumnak valamely rögzített irányú komponensét. Ellentétben a klasszikus elmélettel,

ez a változó — függetlenül a külső erők specális fajtájától — csak a  $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  és

$-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  értékeket veheti fel. A mondott új változó fellépte ennél fogva egy elektron

esetében a sajátfüggvénynek egyszerűen két  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  helyfüggvényre,  $N$  elektron általánosabb esetében pedig  $2^N$  függvényre való felbomlását eredményezi. Ezek tekintendők „valószínűségi amplitúdóknak”: meghatározzák annak valószínűségét, hogy a rendszer valamely meghatározott stacionárius állapotában nem csupán az elektronok helykoordinátái fekszenek adott infinitezimális közbelen, hanem sajátmomentumuk

kiválasztott, rögzített irányú komponense is adott értékű ( $\psi_\alpha$  esetében a  $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$ ,

$\psi_\beta$  esetében a  $-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  értéket veszi fel). Módszereket adunk meg arra, hogy a rend-

szer adott Hamilton-függvénye mellett a  $\psi$ -függvényekre ugyanannyi szimultán differenciálegyenletet állítsunk fel, amennyi ezen függvények száma (2 vagy  $2^N$ ). Ezek az egyenletek következményeiket tekintve Heisenberg és Jordan mátrixegyenleteivel teljesen egyenértékűek. Ezenkívül több elektron esetében a differenciálegyenleteknek azt a megoldását, amely az „ekvivalencia-szabálynak” eleget tesz, Heisenberg és Dirac nyomán két elektron változóinak felcserélésekor mutatott szimmetria-tulajdonsága segítségével egyszerű módon jellemezzük.

1. *Általános megjegyzések az elektron mágnességének beépítéséről a Schrödinger-féle kvantummechanikába.* A Goudsmit és Uhlenbeck által a színeképek komplex-szerkezetének és anomális Zeeman-effektusának értelmezésére első ízben alkalmazott

hipotézist, mely szerint az elektron  $\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  sajátimpulzusmomentum és egy mag-

netonnyi mágneses momentum hordozója, Heisenberg és Jordan<sup>1</sup> építette be a mátrix-számítás segítségével a kvantummechanikába s tette ezáltal kvantitativ precízzé. Míg egyébként a mátrixmódszer matematikailag tökéletesen egyenértékű a több-

\* ZS. f. Phys. 43, 601, 1927.

<sup>1</sup> ZS. f. Phys. 37, 263, 1926.



dimenziós térbeli sajátfüggvények *Schrödingertől* felfedezett módszerével, az elektron sajátmomentumára külső terekben ható erő és forgatónyomaték tárgyalását a megfelelő módszerrel megkísérelve sajátos formális nehézségekkel találjuk magunkat szemben. Egy újabb szabadsági fok bevezetésekor, mely a sajátmomentum térbeli irányításának felel meg, ezen momentum külső mágneses térben kvantumszerűen lehetséges *két* helyzetének tapasztalatilag megalapozott ténye ugyanis a szögváltozóban (pl. az impulzusmomentumnak valamely rögzített koordinátatengely körül mért azimutjában) többértékű, mégpedig *kétértékű* sajátfüggvényekre vezet. Ezért sokan úgy vélték, hogy ez a leírás a kétértékű sajátfüggvények segítségével — bár formálisan lehetséges — nem ad híven számot a valóságos fizikai tényállásról, és a probléma megoldását más irányban keresték. Így *Darwin*<sup>2</sup> nemrég megkísérelte, hogy az elektron sajátimpulzusmomentumának feltevésében foglalt tényeket — az elektron pörgettyű-jellegű szabadsági fokának megfelelő új konfigurációs térbeli dimenzió bevezetése nélkül — azáltal ragadja meg, hogy a de Broglie-hullámok amplitúdóját irányított mennyiségnek, azaz a Schrödinger-féle sajátfüggvényeket vektor-jellegűnek tekinti. Ha azonban kísérletet teszünk arra, hogy ezt az első pillantásra ígéretesnek látszó utat következetesen végiggondoljuk, úgy nehézségek bukkannak fel, melyek ismét éppen az elektron beállásainak számát valamely külső térben megadó 2-es számmal függnek össze. Nem hiszem, hogy ezeket a nehézségeket sikerül majd leküzdeni. Másrészt a mágneses elektron kvantummechanikai viselkedésének leírására a sajátfüggvények módszerével különösképpen a több-elektronos atomok esetében azért igen kíváncsú, mert a kvantummechanikai egyenleteknek a természetben egyedül megvalósuló, az „ekvivalencia-szabályt” teljesítő megoldásai az összes, a jelenlegi elmélet szerint lehetséges megoldások közül *Heisenberg*<sup>3</sup> és *Dirac*<sup>3</sup> szerint a legáttekinthetőbb módon a sajátfüggvények két elektron változóinak felcserélésekor mutatott szimmetria-tulajdonságai segítségével választhatók ki.

Itt meg szeretnénk mutatni, hogy alkalmas módon felhasználva a kvantummechanika *Jordan*<sup>4</sup> és *Dirac*<sup>4</sup> által felállított megfogalmazását, mely megengedi a Schrödinger-féle  $\psi$  függvény általános kanonikus transzformációinak alkalmazását, ténylegesen megadható a mágneses elektron viselkedésének kvantummechanikai leírása a sajátfüggvények módszerének megfelelően anélkül, hogy többértékű függvényekhez kellene folyamodnunk. Ezt azáltal sikerül elérnünk, hogy az elektronok súlypontjának  $q$  helykoordinátái mellé új független változóként az egyes elektronok sajátimpulzusmomentumának valamely rögzített irányú komponensét vezetjük be (a hozzá konjugált szögváltozó helyett). Amint azt alább a 2. szakaszban először egyetlen elektron speciális esetére megmutatjuk, a sajátfüggvény (ha nincs elfajulás) minden egyes kvantumállapotban általában *két* függvényre,  $\psi_\alpha(q_k)$ -ra és  $\psi_\beta(q_k)$ -ra bomlik fel, melyek abszolút értékének négyzete  $dq_1 \dots dq_f$ -fel megszorozva annak valószínűségét adja meg, hogy ebben az állapotban nem csupán a  $q_k$  koordináták fekszenek az előre megadott  $q_k$ ,  $q_k + dq_k$  közökben, hanem azonkívül még a sajátimpulzusmomentum rögzített irányú komponense a  $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$ , ill.  $-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  értéket

<sup>2</sup> Nature **119**, 282, 1927.

<sup>3</sup> W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **38**, 411, 1926; **39**, 499, 1926; **41**, 239, 1927. P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **112**, 661, 1926.

<sup>4</sup> P. Jordan, ZS. f. Phys. **40**, 809, 1927; Gött. Nachr. 1926, 161. old.; P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (A) **113**, 621, 1927; vö. még F. London, ZS. f. Phys. **40**, 193, 1926.



veszi fel. Megmutatjuk továbbá, miképpen lehet a sajátmomentumnak valamely előre megadott koordináta-rendszerre vonatkozó  $s_x, s_y, s_z$  komponensei számára alkalmas, lineáris operátorokat választva a mágneses elektron sajátfüggvényeinek meghatározására külső erőterekben differenciálegyenleteket felállítani, melyek egyenértékűek Heisenberg és Jordan mátrixegyenleteivel. A külső mágneses térbe helyezett nyugvó elektron, s a hidrogénhez hasonló atomok esetére ezt részletesebben a 4. szakaszban visszüket keresszük. Megvizsgáljuk továbbá, miképpen transzformálódnak a sajátfüggvények a koordinátatengelyek elforgatásakor.

A mágneses elektron sajátfüggvényeinek ebben a dolgozatban megadott differenciálegyenletei csupán ideiglenesnek és közelítőnek tekintendők, mivel azok írásmódjukból láthatóan — hasonlóan a Heisenberg—Jordan-féle mátrix-megfogalmazáshoz — nem relativisztikusan invariánsak, és a hidrogén atomra csak abban a közelítésben érvényesek, amelyben a sajátmomentum dinamikai viselkedése szekuláris perturbációnak tekinthető (a klasszikus elméletben ez azt jelenti, hogy a keringés periódusára átlagolhatunk). Nevezetesen jelenleg még nem lehetséges

tehát a hidrogén finomszerkezetében az  $\alpha^2 Z^2$   $\left( \alpha = \frac{2\pi e^2}{hc} = \text{finomszerkezet-állandó} \right)$  magasabb hatványaival arányos korrekciókat kvantummechanikailag kiszámítani, melyeknek a röntgen-színképekben tapasztalati meghatározott értékét a Sommerfeld-képlet jól leírja. A nehézségeket, melyek e probléma megoldásának ez idő szerint még az útjában állnak, röviden a 4. szakaszban tárgyaljuk.

Habár a mágneses elektron kvantummechanikájának itt közölt megfogalmazása ebben a tekintetben még egyáltalán nem kielégítő, előnye másrésről, hogy — mint azt az 5. szakaszban majd kifejtjük — több elektron esetében (a Darwin-féle megfogalmazással ellentétben) semmilyen új nehézségre nem vezet és lehetővé teszi azt is, hogy a sajátfüggvények szimmetria-tulajdonságait, melyek Heisenberg szerint az „ekvivalencia-szabály” kielégítéséhez szükségesek, könnyűszerrel megfogalmazzuk. Éppen ez ebből látszott indokoltnak, hogy az itt javasolt módszert már most közzétegyem, és talán még azt is remélhetjük, hogy a módszer a jelenleg még megoldatlan probléma: a hidrogén-finomszerkezet magasabb közelítéseinek kiszámítása esetében is hasznosnak bizonyul majd.

2. A sajátmomentum rögzített irányú komponensének mint független változónak bevezetése az elektron sajátfüggvényébe. A sajátmomentum komponenseinek megfelelő operátorok definíciója. A klasszikus mechanikában az elektron momentumának dinamikai viselkedése a következő kanonikus változó-párok segítségével írható le: 1) az elektron teljes sajátmomentumának  $s$  abszolút értéke és a sajátmomentum tengelye körül mért  $\chi$  elforgatási szög; 2) a sajátmomentum  $s_z$  komponense a rögzített  $z$  irányban és a momentumvektornak az  $xz$ -síktól számított  $\varphi$  azimutja a  $z$ -tengely körül. Minthogy az  $s_z/s$  hányados az ezen vektor és a  $z$ -tengely által bezárt szög koszinuszát adja meg, az előbbi  $x$ - és  $y$ -komponense így írható fel:

$$s_x = \sqrt{s^2 - s_z^2} \cos \varphi, \quad s_y = \sqrt{s^2 - s_z^2} \sin \varphi.$$

Minthogy a  $\chi$  szög mindenkor ciklikus (azaz a Hamilton-függvényben nem lép fel),  $s$  állandó marad és rögzített számnak tekinthető, úgyhogy csupán  $(s_z, \varphi)$  marad mint lényeges, az elektron momentumának dinamikai viselkedését meghatározó kanonikus változó-pár.



Az eredeti Schrödinger-féle módszert alkalmazva egyetlen elektron esetében minden egyes kvantumállapothoz (mely — ha az elfajulást külső erőkterekben feloldottuk — az adott  $E$  energiaértékkel egyértelműen jellemezhető) egy-egy sajátfüggvény tartozik, mely az elektron súlypontjának három helykoordinátáján kívül (melyeket röviden  $q_k$ -val vagy egyszerűen  $q$ -val jelölünk) még a  $\varphi$  szögtől is függ. Ekkor

$$|\psi_E(q, \varphi)|^2 dq_1 dq_2 dq_3 d\varphi$$

annak valószínűségét adja meg, hogy a szóban forgó energiájú kvantumállapotban nem csak a helykoordináták fekszenek a  $q_k, q_k + dq_k$  közt, hanem  $\varphi$  is a  $\varphi, \varphi + d\varphi$  közt fekszik. Ha valamely dinamikai függvényben a  $\varphi$ -hez konjugált  $s_z$  momentumváltozó fellép, úgy ezt a  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$  operátorral kellene helyettesítenünk, melyet a hullámfüggvényre kell alkalmaznunk éppúgy, ahogy a  $q_k$ -hoz konjugált  $p_k$  transzlációs impulzus-komponenst a  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$  operátorral reprezentáljuk. Amint azonban tudjuk, az a körülmény, hogy az elektron momentuma számára kvantumosan 2 beállítás megengedett, maga után vonja, hogy az ily módon definiált  $\psi_E(q, \varphi)$  függvény, miközben  $\varphi$  folytonosan változik a 0 értéktől  $2\pi$ -ig, nem tér vissza a kiindulási értékhez, hanem előjelet vált.

Az ilyen kétértékűség, s egyáltalán bármilyen polárszög explicit felléptét azáltal kerülhetjük el, hogy  $\varphi$  helyett az  $s_z$  momentumkomponenst vezetjük be a sajátfüggvénybe független változóként. Ezzel kapcsolatban a kvantummechanikában fellép még egy különleges egyszerűsítő körülmény. A klasszikus mechanikában az  $s_z$  mennyiség, eltekintve a speciális esettől, amikor az a mozgásegyenleteknek integrálja, meghatározott energia mellett folytonos értékkel rendelkezik (pl. ha a momentumvektor egy a  $z$ -tengelytől különböző irány körül precesszál). A kvantummechanikában azonban az  $s_z$  komponens — egy szögkoordináta konjugáltja — csak a  $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  és  $-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  sajátértékeket veheti fel; ez azt jelenti, hogy a  $\psi_E(q_k, s_z)$  függvény a

$$\psi_{\alpha, E}(q_k) \quad \text{és} \quad \psi_{\beta, E}(q_k)$$

függvényekre esik szét, melyek az  $s_z = +\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$ , ill.  $s_z = -\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  értékeknek felelnek meg. A

$$|\psi_{\alpha, E}(q_k)|^2 dq_1 dq_2 dq_3$$

kifejezés annak valószínűségét adja meg, hogy a szemügyre vett stacionárius állapotban — miközben  $q_k$  a  $q_k, q_k + dq_k$  közt fekszik — az  $s_z$  momentumkomponens a  $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  értéket veszi fel;

$$|\psi_{\beta, E}(q_k)|^2 dq_1 dq_2 dq_3$$

pedig annak a valószínűsége, hogy  $q_k$  ugyanezen értékei mellett az  $s_z$  komponensnek  $-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  az értéke. Minden kísérlet az  $s_z$  mennyiség mérésére valamely adott stacionárius állapotban mindig csak e két érték,  $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  és  $-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  valamelyikét fogja



szolgáltatni, akkor is, ha  $s_z$  nem integrálja a mozgásegyenleteknek. Ezt a speciális esetet (pl. erős mágneses tér a  $z$ -irányban) inkább az tünteti ki, hogy ekkor meghatározott  $E$  energia mellett a  $\psi_{\alpha,E}$ ,  $\psi_{\beta,E}$  függvények közül mindenkor csak az egyik különbözik zérustól. Meghatározott koordináta-rendszer választásával  $\psi_\alpha$  és  $\psi_\beta$  minden egyes stacionárius állapotban, a

$$\int (|\psi_\alpha|^2 + |\psi_\beta|^2) dq_1 dq_2 dq_3 = 1 \quad (1a)$$

normálási feltétel szerint, egy közös fázistényező erejéig teljesen meg van határozva. Fenn kell állnia ezenkívül az

$$\int (\psi_{\alpha,n} \psi_{\alpha,m}^* + \psi_{\beta,n} \psi_{\beta,m}^*) dq_1 dq_2 dq_3 = 0 \quad (n \neq m) \quad (1b)$$

ortogonalitási összefüggésnek. Itt  $n$  és  $m$  egymástól különböző kvantumállapotokat jelölnek, a csillag pedig (itt és a következőkben) a konjugált komplex érték jele.<sup>5</sup>

Abból a célból, hogy továbbra is differenciálegyenletekkel dolgozhassunk, melyeknek a  $\psi_\alpha$ ,  $\psi_\beta$  függvények adott Hamilton-függvény mellett megoldásai, oly módon járhatnánk el, hogy az utóbbit kifejezzük mint  $p_k$ ,  $q_k$  és  $s_k$ ,  $\varphi$  függvényét s azután  $p_k$ -t a  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$  operátorral,  $\varphi$ -t pedig a  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial s_z}$  operátorral helyettesítjük. Az így kapott operátort kellene azután  $\psi(q_k, s_z)$ -re alkalmaznunk és végül áttérni a határesetre, amikor  $\psi$  csak  $s_z = +\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  és  $s_z = -\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  mellett különbözik zérustól. Ez az eljárás azonban nem lenne áttekinthető és kevésbé lenne célszerű. A ténylegesen előforduló Hamilton-függvények mindenekelőtt általában az  $s_x$ ,  $s_y$ ,  $s_z$  impulzusmomentum-komponenseket tartalmazzák változóként s ezért célszerű ezek számára közvetlenül, a polárszögön keresztül vezető kerülő út megtakarításával, alkalmas operátorokat bevezetni.

Ezeknek az operátoroknak (eltekintve az előjeltől, vö. alább) ugyanazon felcserélési összefüggéseket kell teljesíteniök, mint a megfelelő mátrixoknak. Jelentse  $\mathbf{s}$  az  $s_x$ ,  $s_y$ ,  $s_z$  komponensekkel rendelkező vektormátrixot; fennáll:<sup>6</sup>

$$\mathbf{s} \times \mathbf{s} = -\frac{h}{2\pi i} \mathbf{s}; \quad \mathbf{s}^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 s(s+1) \quad (s=1/2).$$

A következőkben  $\mathbf{s}$ -et az egyszerűség kedvéért az  $\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  egység segítségével fejezzük ki (azaz  $\mathbf{s}$ -et  $\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \mathbf{s}$ -szel helyettesítjük) és a vektoregyenleteket kiírjuk a komponensekre:

$$\left. \begin{aligned} s_x s_y - s_y s_x &= 2is_z, \dots, \\ s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 &= 3; \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

<sup>5</sup> Itt mellékesen megemlítjük, hogy a Dirac—Jordan-féle transzformáció-elmélet szerint a korábban említett  $\psi(q, \varphi)$  függvény a  $\psi_\alpha$ ,  $\psi_\beta$  függvényekkel a

$$\psi(q, \varphi) = \psi_\alpha(q) e^{\frac{i\varphi}{2}} + \psi_\beta(q) e^{-\frac{i\varphi}{2}}$$

kapcsolatban áll.

<sup>6</sup> Vö. W. Heisenberg és P. Jordan, i. m., (10) egyenlet. A mátrixokat és operátorokat („ $q$ -számokat”) a következőkben vastag betűk jelölik.



itt a kipontozás azokat az egyenleteket jelzi, amelyek a kiírtból a koordináták ciklikus felcserélésével kaphatók.<sup>7</sup>

Kézenfekvő azt a feltevést tenni, hogy a (2) összefüggéseket teljesítő  $s_x, s_y, s_z$  operátorok  $\psi_\alpha$ -t és  $\psi_\beta$ -t *lineárisan transzformálják*; a legegyszerűbb lehetőség a következő:

$$\left. \begin{aligned} s_x \psi_\alpha &= \psi_\beta, & s_x \psi_\beta &= \psi_\alpha; \\ s_y \psi_\alpha &= -i\psi_\beta, & s_y \psi_\beta &= i\psi_\alpha; \\ s_z \psi_\alpha &= \psi_\alpha, & s_z \psi_\beta &= -\psi_\beta. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Ezek az összefüggések az alábbi szimbolikus mátrix-alakban is felírhatók:

$$s_x \psi = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \psi, \quad s_y \psi = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \psi, \quad s_z \psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \psi. \quad (3')$$

A (2) összefüggéseket most úgy kell értenünk, hogy a (3') mátrixok, ha azokat behelyettesítjük (2)-be, a mátrixok szorzására vonatkozó megszokott előírás<sup>8</sup> alkalmazása esetén ezeknek az összefüggéseknek tesznek eleget. *A megfelelő operátorok azonban olyan egyenleteknek tesznek eleget, amelyek (2)-ből valamennyi szorzás sorrendjének felcserélése útján állnak elő.*<sup>9</sup> Ezen előírás igazolását az operátor- és mátrixszámítás általános összefüggése fogja megadni. A (3) összefüggések közül az utolsó nyilvánvalóan fizikailag szükségszerű, ha  $\psi_\alpha$  és  $\psi_\beta$  annak valószínűségi amplitúdóit jelentik, hogy  $s_z$   $\left( \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \right.$  egységül választása mellett) a  $+1$ , ill.  $-1$

<sup>7</sup> Annak folytán, hogy  $s$  kvantumosan megengedett beállásainak száma kettő (hogy tehát  $2 \times 2$ -es mátrixokkal van dolgunk), a (2) összefüggéseken kívül fennállnak még a következő élesebb relációk is:

$$\left. \begin{aligned} s_x s_y &= -s_y s_x = i s_z, \dots, \\ s_x^2 &= s_y^2 = s_z^2 = 1. \end{aligned} \right\} \quad (2a)$$

Ez a legegyszerűbben úgy látható be, hogy  $s_z$ -t átlós mátrixnak választjuk (az összefüggések azonban általános érvényűek). Ha  $r \times r$ -es mátrixokról van szó, melyek teljesítik (2)-t (amikor is a 3 szám  $r^2 - 1$ -gyel helyettesítendő), úgy  $s_x s_y$  és  $s_y^2$  el nem tűnő mátrixelemekkel rendelkeznek azokon a helyeken, amelyeknek sorindexe kettővel különbözik az oszlopindextől (amelyek tehát az  $s_z$ -hez tartozó kvantumszám két egységnyi megváltozásával járó átmeneteknek felelnek meg), úgyhogy a (2a) egyenletek nem állhatnak fenn.

A (2a) összefüggések fennállására P. Jordan volt szíves felhívni a figyelmemet, amiért itt szeretnék neki köszönetet mondani. Rámutatott a következő, a kvaternió-elmélettel fennálló összefüggésre. Írjuk a  $Q$  kvaterniót a

$$Q = k_1 A + k_2 B + k_3 C + D$$

alakba; ekkor a  $k_1, k_2, k_3$  „egységek” a

$$\begin{aligned} k_1 k_2 &= -k_2 k_1 = k_3, \dots, \\ k_1^2 &= k_2^2 = k_3^2 = -1 \end{aligned}$$

összefüggéseknek tesznek eleget. Ezek egyenértékűek a (2a) összefüggésekkel, ha elvégezzük a következő azonosítást:

$$s_x = ik_1, \quad s_y = ik_2, \quad s_z = ik_3.$$

<sup>8</sup> Vö. a 11. lábjegyzettel.

<sup>9</sup> Csak utólag, C. G. Darwin levélbeli közléséből — mely az általa felállított egyenletek és az enyéim összehasonlítására vonatkozott — tudtam meg, hogy itt különbséget kell tennünk operátor- és mátrix-összefüggések között. (Lásd alább a 16. lábjegyzetet.) Ezért C. G. Darwinnak itt őszinte köszönetet mondok.



értéket veszi fel; ekkor ugyanis az  $s_z$  operátor a sajátfüggvényt egyszerűen  $s_z$  szám-értékével szorozza meg. Azt, hogy az  $s_x, s_y$  speciális választásában foglalt, a (2) relációk támasztotta követelményen túlmenő normálás nem jelenti az általánosság korlátozását, látni fogjuk a következő szakaszban, ahol megvizsgáljuk majd a  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  függvények viselkedését az őket definiáló koordináta-rendszer tengelyeinek elforgatásakor. [Vö. (3'').]

Legyen adott valamely speciális mechanikai rendszernek, mely mágneses elektront tartalmaz, a Hamilton-függvénye:

$$H(p_k, q_k, s_x, s_y, s_z) = E;$$

ekkor

$$\left. \begin{aligned} H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}, q_k, s_x, s_y, s_z\right) \psi_{E,\alpha} &= E \psi_\alpha \\ H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}, q_k, s_x, s_y, s_z\right) \psi_{E,\beta} &= E \psi_\beta \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

és

ahol  $s_x, s_y, s_z$  helyére a (3) operátorokat kell beírni, a  $\psi_\alpha$  és  $\psi_\beta$  függvényekre vonatkozó két szimultán differenciálegyenletet képez, melyek egyszersmind az  $E$  sajátértékeket is meghatározzák.

Valamely  $f(p, q, s_x, s_y, s_z)$  függvény mátrix-komponenseit, amelyről tegyük most fel, hogy az  $s_x, s_y, s_z$  mennyiségeket nem vagy csak lineárisan tartalmazzák, a következő szimultán egyenletek definiálják:

$$\mathbf{f}\psi_{m\alpha} = \sum_n f_{nm} \psi_{n\alpha}, \quad \mathbf{f}\psi_{m\beta} = \sum_n f_{nm} \psi_{n\beta}, \quad (5)$$

ahol  $\mathbf{f}$ -en az  $f\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q, s_x, s_y, s_z\right)$  operátort kell érteni. Speciálisan fennáll tehát

$$s_x \psi_{m\alpha} = \psi_{m\beta} = \sum_n (s_x)_{nm} \psi_{n\alpha}; \quad s_x \psi_{m\beta} = \psi_{m\alpha} = \sum_n (s_x)_{nm} \psi_{n\beta}, \quad (6)$$

továbbá a megfelelő egyenletek  $y$ -ra és  $z$ -re. Lényeges, hogy (5) és (6) jobb oldalán a mátrix első indexére kell összegezni; ez biztosítja az összhangot két operátor,  $\mathbf{f}$  és  $\mathbf{g}$ , egymást követő alkalmazásának sorrendje és a mátrixok szorzására vonatkozó előírások között. Az (1a) és (1b) ortogonalitási összefüggések folytán (6)-ból könnyűszerrel kapjuk:

$$f_{nm} = \int [(\mathbf{f}\psi_{m\alpha})\psi_{n\alpha}^* + (\mathbf{f}\psi_{m\beta})\psi_{n\beta}^*] dq_1 dq_2 dq_3. \quad (5')$$

Speciálisan fennáll:

$$\begin{aligned} (s_x)_{nm} &= \int [(s_x \psi_{m\alpha})\psi_{n\alpha}^* + (s_x \psi_{m\beta})\psi_{n\beta}^*] dq = \int (\psi_{m\beta} \psi_{n\alpha}^* + \psi_{m\alpha} \psi_{n\beta}^*) dq, \\ (s_y)_{nm} &= \int [(s_y \psi_{m\alpha})\psi_{n\alpha}^* + (s_y \psi_{m\beta})\psi_{n\beta}^*] dq = \int i(-\psi_{m\beta} \psi_{n\alpha}^* + \psi_{m\alpha} \psi_{n\beta}^*) dq, \\ (s_z)_{nm} &= \int [(s_z \psi_{m\alpha})\psi_{n\alpha}^* + (s_z \psi_{m\beta})\psi_{n\beta}^*] dq = \int (\psi_{m\alpha} \psi_{n\alpha}^* - \psi_{m\beta} \psi_{n\beta}^*) dq. \end{aligned} \quad (6')$$



Vegyük szemügyre a

$$\psi_\alpha = \sum c_n \psi_{n\alpha}, \quad \psi_\beta = \sum c_n \psi_{n\beta}$$

általános sajátfüggvényeket meghatározatlan  $c_n$  együtthatókkal; a

$$d_x = \psi_\beta \psi_\alpha^* + \psi_\alpha \psi_\beta^*,$$

$$d_y = -i(\psi_\beta \psi_\alpha^* - \psi_\alpha \psi_\beta^*),$$

$$d_z = \psi_\alpha \psi_\alpha^* - \psi_\beta \psi_\beta^*$$

kifejezések ekkor formálisan a sajátmomentum térbeli sűrűségének szerepét töltik be.

Még igazolnunk kell, hogy a (6') szerint számított mátrixelemek általában elegendenek Heisenberg és Jordan (2) összefüggéseinek. Képezzük az

$$(s_i s_k)_{nm} = \sum_l (s_i)_{nl} (s_k)_{lm}$$

kifejezést; itt  $i$  és  $k$  mindketten az  $x, y, z$  indexek valamelyikét jelentik. Helyettesítsük be ide  $(s_k)_{lm}$  helyére annak (6') kifejezését. Ily módon kapjuk:

$$(s_i s_k)_{nm} = \int \left\{ \left[ \sum_l (s_i)_{nl} \psi_{lz}^* \right] s_k \psi_{mx} + \sum_l [(s_i)_{nl} \psi_{l\beta}^*] s_k \psi_{m\beta} \right\} dq.$$

Az  $s_i$  mátrixok — amint az (6') alapján könnyen igazolható — hermitikusak; (6) szerint fennáll tehát

$$\sum_l (s_i)_{nl} \psi_{lz}^* = \sum_l (s_i)_{ln}^* \psi_{lz}^* = [s_i \psi_{nz}]^*,$$

s ugyanígy

$$\sum_l (s_i)_{nl} \psi_{l\beta}^* = [s_i \psi_{n\beta}]^*.$$

A végeredmény tehát

$$(s_i s_k)_{nm} = \int \left\{ [s_i \psi_{nz}]^* s_k \psi_{mx} + [s_i \psi_{n\beta}]^* s_k \psi_{m\beta} \right\} dq.$$

Ezen összefüggés alapján, behelyettesítve a (3) operátorokat és összehasonlítva (6')-vel, könnyen igazoltuk valamennyi (2) alatt felírt összefüggést, ha ezeket mátrix-relációként fogjuk fel. Pl.  $i=x, k=z$  esetén (6') szerint kapjuk:

$$(s_x s_y - s_y s_x)_{nm} = 2i \int (-\psi_{n\beta}^* \psi_{m\beta} + \psi_{nz}^* \psi_{mz}) dq = 2i (s_z)_{nm}.$$

Ugyanígy győződhetünk meg a (2) alatt felírt többi összefüggés igazságáról. Ezzel egyszersmind igazolhatjuk a (3) operátorok választását.

A (4) alakú egyenletekre példákat a 4. szakaszban fogunk megadni.

3. A  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  függvények viselkedése a koordináta-rendszer elforgatásakor. A Dirac—Jordan-féle elméletben általános választ kapunk a kérdésre: Miképpen transzformálódnak a  $\psi$  sajátfüggvények, ha a kanonikus változók valamely  $(p, q)$  rendszeréről egy új  $(P, Q)$  rendszerre térünk át? Legyen  $S$  az az operátor, mely a  $q$  (= szorzás  $q$ -val) és  $p = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$  operátorokat a

$$P = SpS^{-1}, \quad Q = SqS^{-1} \quad (7)$$

képleteknek megfelelően az új változóknak megfelelő  $P, Q$  operátorokba transz-



formálja. Ekkor a  $Q$ -hoz tartozó  $\psi_E(Q)$  sajátfüggvényt a  $q$ -hoz tartozó  $\psi_E(q)$  sajátfüggvényből egyszerűen az  $S$  operátor alkalmazásával kapjuk:

$$\psi_E(Q) = S\psi_E(q). \quad (8)$$

A

$$|\psi_E(Q)|^2 dQ$$

kifejezés most is annak a valószínűségét adja meg, hogy meghatározott  $E$  energia, valamint  $P$  tetszőleges értéke mellett a  $Q$  változó a  $Q$  és  $Q + dQ$  értékek közé esik.<sup>10</sup>

Esetünkben minden esetre nem magukkal az  $(s_z, \varphi)$  kanonikus változókkal fogunk foglalkozni, hanem a sajátmomentum  $s_x, s_y, s_z$  komponenseivel, melyekre a nem-kanonikus alakú (2) felcserélési összefüggések állnak fenn. Választ kell majd adnunk arra a kérdésre, hogy az adott  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  sajátfüggvényekből és valamely meghatározott  $(x, y, z)$  koordináta-rendszerre vonatkozó  $s_x, s_y, s_z$  operátorokból miképpen számíthatók ki az új  $(x', y', z')$  koordináta-rendszerre vonatkoztatott  $\psi'_\alpha, \psi'_\beta$  sajátfüggvények és  $s_x, s_y, s_z$  operátorok. Az új  $\psi'_\alpha, \psi'_\beta$  sajátfüggvények abszolút érték négyzete ekkor annak valószínűségét határozza meg, hogy (az elektron  $q$  helykoordinátáinak bizonyos értékeire) a  $z'$ -tengely körül mért  $\varphi'$  szög tetszőleges értéke

mellet az  $s_z$  momentum  $\left( \text{az } \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \text{ egységben mérve} \right)$  a  $+1$ , ill.  $-1$  értékeket veszi fel.

A (7) operátor-egyenlet szempontjából mármint nem lényeges, hogy a  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$  és a  $\mathbf{P}, \mathbf{Q}$  operátorok felcserélési összefüggései éppen kanonikus alakúak. A lényeges inkább az, hogy a felcserélési összefüggések a transzformációkor megőrzik alakjukat, azaz helyesek maradnak akkor is, ha a régi változók helyére egyszerűen beírjuk az újakat. Esetünkben ténylegesen tudjuk, hogy a (2) összefüggések ortogonális koordináta-transzformációk elvégzése után változatlan alakban fennállnak, úgyhogy a vesszős mennyiségekre is fennáll

$$\left. \begin{aligned} s_{x'} s_{y'} - s_{y'} s_{x'} &= 2i s_{z'}, \dots, \\ s_{x'}^2 + s_{y'}^2 + s_{z'}^2 &= 3. \end{aligned} \right\} \quad (2')$$

Írhatjuk tehát

$$s_{x'} = S s_x S^{-1}, \quad s_{y'} = S s_y S^{-1}, \quad s_{z'} = S s_z S^{-1}. \quad (9)$$

A  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  sajátfüggvényekre alkalmazott operátorok legkényelmesebb formális előállítását a mátrix-előállítás, melyet már fent (3') alatt is használtunk. Ha az  $S$  operátor a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvény-párt  $(S_{11}\psi_\alpha + S_{12}\psi_\beta, S_{21}\psi_\alpha + S_{22}\psi_\beta)$ -ba viszi át, ahol  $S_{11}, S_{12}, S_{21}, S_{22}$  közönséges numerikus együtthatók, úgy  $S$  felírható, mint mátrix:

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}.$$

<sup>10</sup> Az, hogy éppen az  $E$  energiát választjuk rögzített paraméternek, csupán speciális esete a Dirac és Jordan által vizsgált transzformációknak. Ezek a szerzők részletesen megvizsgálták az összefüggést az operátor két különböző előállítása között: 1) a differenciál-előállítás, mely az

$S = S \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, x \right)$  operátort az  $x$  szerinti differenciálásból és az  $x$ -szel való szorzásból építi fel, 2)  $S$  integrál-előállítás, mely szerint

$$Sf(q) = \int S(x, q) f(x) dx,$$

ahol  $S(x, q)$  közönséges függvény.



Ahhoz, hogy az (1a), (1b) összefüggések az új  $(S\psi_\alpha, S\psi_\beta)$  párra is fennálljanak,  $S$ -nek teljesítenie kell az ismert

$$SS^* = 1 \quad (10)$$

ortogonalitási összefüggést; itt a  $*$  a konjugált komplex jele, a felülvonás pedig a mátrix sorainak és oszlopainak felcserélését jelenti. Részletesen kiírva<sup>11</sup>

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{21}^* \\ S_{12}^* & S_{22}^* \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} S_{11}S_{11}^* + S_{12}S_{12}^* & S_{11}S_{21}^* + S_{12}S_{22}^* \\ S_{21}S_{11}^* + S_{22}S_{12}^* & S_{21}S_{21}^* + S_{22}S_{22}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10')$$

Másrésztől a sajátmomentum komponenseinek definíciójából következik, hogy a nekik megfelelő operátoroknak ugyanúgy kell transzformálódniuk, mint a koordinátáknak, azaz — a  $\Theta$ ,  $\Phi$ ,  $\Psi$  szögeket bevezetve — az

$$\left. \begin{aligned} s_x &= (\cos \Phi \cos \Psi - \sin \Phi \sin \Psi \cos \Theta) s_{x'} + \\ &\quad + (-\sin \Phi \cos \Psi - \cos \Phi \sin \Psi \cos \Theta) s_{y'} + \sin \Psi \sin \Theta s_{z'}, \\ s_y &= (\cos \Phi \sin \Psi + \sin \Phi \cos \Psi \cos \Theta) s_{x'} + \\ &\quad + (-\sin \Phi \sin \Psi + \cos \Phi \cos \Psi \cos \Theta) s_{y'} - \cos \Psi \sin \Theta s_{z'}, \\ s_z &= \sin \Phi \sin \Theta s_{x'} + \cos \Phi \sin \Theta s_{y'} + \cos \Theta s_{z'} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

képletek szerint.<sup>12</sup> A célunk most: az  $S$  mátrixot oly módon meghatározni, hogy (9) és (11) megegyezzenek. Ha ez sikerül, úgy ezzel a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvénypár transzformációjára vonatkozó kérdésünket a

$$(\psi'_\alpha, \psi'_\beta) = S(\psi_\alpha, \psi_\beta) \quad (12)$$

vagy

$$\left. \begin{aligned} \psi'_\alpha &= S_{11}\psi_\alpha + S_{12}\psi_\beta, \\ \psi'_\beta &= S_{21}\psi_\alpha + S_{22}\psi_\beta \end{aligned} \right\} \quad (12a)$$

egyenletekkel megválaszoltuk.

Ahhoz, hogy a (9) és (11) képleteket egymással megegyezővé tegyük, célszerű bevezetni a következő, a pörgettyű-elméletben szokásos jelöléseket:

$$\left. \begin{aligned} \xi &= s_x + is_y, & \eta &= -s_x + is_y, & \zeta &= -s_z, \\ \xi' &= s_{x'} + is_{y'}, & \eta' &= -s_{x'} + is_{y'}, & \zeta' &= -s_{z'}, \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \cos \frac{\Theta}{2} e^{i \frac{\Phi - \Psi}{2}}, & \beta &= i \sin \frac{\Theta}{2} e^{i \frac{-\Phi + \Psi}{2}}, \\ \gamma &= i \sin \frac{\Theta}{2} e^{i \frac{\Phi - \Psi}{2}}, & \delta &= \cos \frac{\Theta}{2} e^{i \frac{-\Phi - \Psi}{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Az  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  mennyiségek a Cayley—Klein-féle forgásparaméterek; közöttük fennállnak a következő relációk:

$$\delta = \alpha^*, \quad \gamma = -\beta^*, \quad \alpha\delta - \beta\gamma = 1. \quad (14')$$

<sup>11</sup> Emlékeztetünk arra, hogy két mátrix szorzatában az  $(n, m)$  helyen álló elem az első mátrix  $n$ -edik sorának a másik mátrix  $m$ -edik oszlopával elemenként való összeszorozása útján áll elő.

<sup>12</sup> A következőkre vonatkozóan vö. A. Sommerfeld és F. Klein, Theorie des Kreisels, I, 2—4. §. Lásd különösen az  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  paraméterek definícióját. Ezek jelentőségére problémánk szempontjából P. Jordan hívta fel a figyelmet.



Ekkor (11) helyett írható:<sup>13</sup>

$$\left. \begin{aligned} \xi &= \alpha^2 \xi' + \beta^2 \eta' + 2\alpha\beta \zeta', \\ \eta &= \gamma^2 \xi' + \delta^2 \eta' + 2\gamma\delta \zeta', \\ \zeta &= \alpha\gamma \xi' + \beta\delta \eta' + (\alpha\delta + \beta\gamma) \zeta', \end{aligned} \right\} \quad (11')$$

(9) helyett pedig

$$\xi = S^{-1} \xi' S, \quad \eta = S^{-1} \eta' S, \quad \zeta = S^{-1} \zeta' S. \quad (9')$$

Azt állítjuk, hogy az  $S$  mátrixot egyszerűen azonosítva a Cayley—Klein-féle forgásparaméterek konjugáltjaiból képezett  $\begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix}$  mátrixszal, a (9') és (11') képleteket egymással megegyezésbe hozhatjuk:

$$S = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix} \quad \text{vagy} \quad S_{11} = \alpha^*, \quad S_{12} = \beta^*, \quad S_{21} = \gamma^*, \quad S_{22} = \delta^*. \quad (15)$$

Ennek nem áll akadály az útjában, mivel a (10) összefüggés (14')-ből következően teljesül:

$$\begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta & -\gamma \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Helyettesítsük be (9')-be és (11')-be  $\xi'$ ,  $\eta'$  és  $\zeta'$  helyére a (3')-ből (13) szerint kapható

$$\begin{aligned} \xi' &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \eta' &= -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

és

$$\zeta' = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrixokat. Mindkét egyenletből megegyezően kapjuk:

$$\begin{aligned} \xi &= \begin{pmatrix} -2\alpha\beta & 2\alpha^2 \\ -2\beta^2 & 2\alpha\beta \end{pmatrix}, \\ \eta &= \begin{pmatrix} -2\gamma\delta & 2\gamma^2 \\ -2\delta^2 & 2\gamma\delta \end{pmatrix}, \\ \zeta &= \begin{pmatrix} -\alpha\delta - \beta\gamma & 2\alpha\gamma \\ -2\beta\delta & \alpha\delta + \beta\gamma \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ezzel a kívánt bizonyítást elvégeztük.

Még néhány kiegészítő megjegyzést kell tennünk. Az egyik ezek közül a koordináta-rendszer  $z$ -tengely körüli elforgatásának speciális esetére vonatkozik; ekkor  $\Theta = 0$ ,  $\beta = \gamma = 0$  és a  $\Phi + \Psi = \omega$  jelölés mellett  $\alpha = e^{\frac{i\omega}{2}}$ ,  $\delta = e^{-\frac{i\omega}{2}}$ . Ebben az esetben kapjuk:

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega} \\ e^{i\omega} & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\omega} \\ ie^{i\omega} & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3'')$$

<sup>13</sup> Theorie des Kreisels, (9) egyenlet, 21. old.



Ezek egyszersmind — amint arról könnyű számítással meggyőződhetünk — a legáltalánosabb mátrixok (a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvénypárra ható legáltalánosabb lineáris transzformációk), melyek hermitikusak és kielégítik a (2) felcserélési összefüggéseket és amelyek közül  $s_z$  az  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  normál-alakkal rendelkezik. Innen látható, hogy a  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  függvényeket a  $z$ -irány megadása nem határozza meg egyértelműen (az  $\omega$  fázis önkényes). Azok csupán az egész  $(x, y, z)$  rendszer megadásával válnak egyértelműen meghatározottá. Már csak ez okból is aligha látszik lehetségesnek, hogy a mágneses elektronhoz irányított (vektoriális) hullámfüggvényeket rendeljünk hozzá.

A második megjegyzés a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvénypár legáltalánosabb hermitikus, a (2) összefüggéseket teljesítő lineáris transzformációinak kérdésére vonatkozik. Könnyű belátni, hogy ezen legáltalánosabb  $s_x, s_y, s_z$  mátrixok alkalmas (9) alakú transzformáció segítségével [ahol  $S$  eleget tesz a (10) összefüggésnek] mindenkor a (3') normálalakra hozhatók. Mindenek előtt megmutatjuk, hogy a (10)-et teljesítő legáltalánosabb  $S$  mindenkor előállítható a (14), (15) alakban a  $\Theta, \Phi, \Psi$  szögek kifejezéséeként. Ezután  $s_z$  egy (9) alakú transzformációval átlós mátrixba transzformálható. A (2) összefüggésekből ekkor már következik, hogy  $s_z$  a kívánt normál-alakkal rendelkezik. Végül még egy alkalmas elforgatást végezve a  $z$ -tengely körül, zérussá tesszük az  $\omega$  fázist  $s_x$ -ben és  $s_y$ -ban.

Összefoglalva mondhatjuk: annak ellenére, hogy az  $s_x, s_y, s_z$  operátorok (3) választása kitüntet egy bizonyos koordináta-rendszert, a kvantummechanikai egyenleteknek a (9) transzformációkkal szemben mutatott invarianciája és a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  párnak a kitüntetett koordináta-rendszer elforgatásakor mutatott, fent vázolt viselkedése garantálja a végeredmény függetlenségét a koordinátatengelyek speciális választásától.

4. A mágneses elektron sajátfüggvényeinek differenciálegyenletei speciális erőterekben. a) Nyugvó elektron homogén mágneses térben. Már (3), (4) alatt megadtuk, miképpen állíthatók fel adott  $H$  Hamilton-függvény mellett a mágneses elektronra vonatkozó  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  sajátfüggvény-pár differenciálegyenletei. Először vegyük szemügyre egy nyugvó elektron esetét, melyet a  $H_x, H_y, H_z$  térerősség-komponensekkel leírt homogén mágneses térbe helyeztünk. Minthogy az elektron nyugszik, a sajátfüggvények nem függenek az elektron helykoordinátáitól. Jelölje  $e$  és  $m_0$  az elektron töltését, ill. tömegét,

$$\mu_0 = \frac{eh}{4\pi m_0 c}$$

pedig a Bohr-magnetont; a Hamilton-függvény ekkor

$$H = \mu_0 (H_x s_x + H_y s_y + H_z s_z),$$

ha a konstans translációs energiát elhagyjuk és az  $s_x, \dots$  komponenseket újra az  $\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  egységben mérjük. Helyettesítsük az  $s_x, s_y, s_z$  komponenseket a (3) operátorokkal (miközben  $\mu_0, H_x, H_y, H_z$  természetesen közönséges számok maradnak); így a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvény-párra a

$$\begin{aligned} \mu_0 [(H_x - iH_y)\psi_\beta + H_z\psi_\alpha] &= E\psi_\alpha, \\ \mu_0 [(H_x + iH_y)\psi_\alpha - H_z\psi_\beta] &= E\psi_\beta \end{aligned} \quad (16)$$



egyenletrendszer kapjuk. Szándékosan nem választottuk mindjárt kezdetben a mágneses tér irányát a (3) operátorok által kitüntetett  $z$ -tengellyel párhuzamosnak, hogy a  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  mennyiségek fizikai jelentését, valamint azoknak az előző szakaszban levzetett transzformációs tulajdonságait egy példán megvilágíthassuk.

A (16) egyenletrendszerből az  $E$  sajátértékek a

$$\begin{vmatrix} \mu_0 H_z - E & \mu_0 (H_x - iH_y) \\ \mu_0 (H_x + iH_y) & -(\mu_0 H_z + E) \end{vmatrix} = 0$$

vagy

$$-(\mu_0^2 H_z^2 - E^2) - \mu_0^2 (H_x^2 + H_y^2) = 0$$

egyenlet megoldása útján kaphatók meg:

$$E = \pm \mu_0 \sqrt{H_x^2 + H_y^2 + H_z^2} = \pm \mu_0 |H|,$$

amint azt ebben az esetben eleve várnunk kellett. A (16) egyenletekből következik továbbá, ha a térirány és a  $z$ -tengely közbezárt szögét  $\Theta$ -val jelöljük és a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvénypárt  $|\psi_\alpha|^2 + |\psi_\beta|^2 = 1$  szerint normáljuk, az  $E = +\mu_0 |H|$  esetben:

$$|\psi_\alpha|^2 = \frac{\sin^2 \Theta}{\sin^2 \Theta + (1 - \cos \Theta)^2} = \frac{\sin^2 \Theta}{2(1 - \cos \Theta)} = \cos^2 \frac{\Theta}{2},$$

$$|\psi_\beta|^2 = \frac{(1 - \cos \Theta)^2}{2(1 - \cos \Theta)} = \sin^2 \frac{\Theta}{2};$$

hasonlóképpen  $E = -\mu_0 |H|$  esetén:

$$|\psi_\alpha|^2 = \sin^2 \frac{\Theta}{2}, \quad |\psi_\beta|^2 = \cos^2 \frac{\Theta}{2}.$$

Ez az eredmény a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvénypár (12), (14), (15) transzformációs tulajdonságai-  
val is összhangban van. Fizikailag ez pl. a következőképpen értelmezhető: Legyen  
a külső mágneses tér először a  $H_x, H_y, H_z$  komponensek által megadott irányú  
s a jelen levő elektronok valamennyien legyenek a térrel párhuzamos állásúak;  
antiparalel állású ne legyen köztük. Ezután forgassuk el a mágneses teret hirtelen a  
 $z$ -irányba. Ekkor azt találjuk, hogy az elektronok  $\cos^2 \frac{\Theta}{2}$  tört része a  $z$ -tengellyel

párhuzamos momentumú,  $\sin^2 \frac{\Theta}{2}$  tört résznek a momentuma pedig a  $z$ -tengellyel  
ellentétes állású lesz, ha pedig az eredetileg csak a tériránnyal ellentétes állású elekt-  
ronok voltak jelen, úgy a fordított eredményt kapjuk.

b) *Mágneses elektron Coulomb-térben (hidrogénszerű atom)*. Térjünk most rá  
a mozgását az atomban végző mágneses elektron  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvénypárjára érvényes  
egyenletek felállítására. Itt következetesen arra az álláspontra kívánunk helyezkedni,  
hogy a magasabb rendű relativisztikus és mágneses korrekciókat elhanyagoljuk,  
és a relativitáselméletből adódó s az elektron sajátmomentumából származó tagokat  
perturbációként fogjuk fel. Hasonlóan az előbbi példához, most is feltételezünk egy  
 $H_x, H_y, H_z$  homogén mágneses teret, hogy a tárgyalás felölelje az anomális Zeeman-  
effektus elméletét is. Nyomatékosan hangsúlyozzuk, hogy az itt felállított egyenletek



a Heisenberg és Jordan<sup>14</sup> által megadott mátrixegyenletekkel matematikailag és fizikailag teljesen egyenértékűek. Ezekről a szerzőktől vesszük át a Hamilton-függvény alakját is.

Az egyelektronos atom Hamilton-függvénye:

$$H_0 = \frac{1}{2m_0} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{Ze^2}{r}$$

( $p_x, p_y, p_z$  = az impulzus komponensei,  $Z$  = a magtöltést meghatározó rendszám).  
A Hamilton-operátor:

$$H_0\psi = -\frac{1}{2m_0} \frac{h^2}{4\pi^2} \Delta\psi - \frac{Ze^2}{r} \psi \quad (17)$$

itt a szokás szerint a  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  jelölést alkalmaztuk. Ezután jönnek azok a tagok, amelyek már egy sajátmomentummal nem rendelkező elektron esetében is fellépnek a külső mágneses tér és a relativisztikus korrekciók folytán:

$$H_1 = -\frac{1}{2m_0c^2} \left( E_0^2 + 2E_0Ze^2 \frac{1}{r} + Z^2e^4 \frac{1}{r^2} \right) + \frac{e}{2m_0c} (\mathfrak{H}[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]);$$

itt  $E_0$  a perturbálatlan energiaérték,  $\mathfrak{H}$  a külső mágneses tér vektora,  $\mathbf{p}$  az impulzus,  $\mathbf{r}$  pedig a magot az elektronnal összekötő rádiusz-vektor.

Ezt operátorként írva kapjuk:

$$H_1\psi = -\frac{1}{2m_0c^2} \left( E_0^2 + 2E_0Ze^2 \frac{1}{r} + Z^2e^4 \frac{1}{r^2} \right) \psi - i\mu_0(\mathfrak{H}[\mathbf{r} \times \text{grad } \psi]). \quad (18)$$

A  $H_0$  és  $H_1$  operátorok egyformán érvényesek  $\psi_\alpha$ -ra és  $\psi_\beta$ -ra; az  $\alpha$  vagy a  $\beta$  indexet nem változtatják meg. Ezekhez járulnak még az elektron sajátmomentumát jellemző tagok; először a sajátmomentum kölcsönhatása a külső mágneses térrel, melyet már az előző példánkban felírtunk, másodsor a sajátmomentummal rendelkező mozgó elektron kölcsönhatása az elektromos Coulomb-térrel, a relativitás-elméletnek megfelelően. Az utóbbit Thomas<sup>15</sup> és Frenkel<sup>15</sup> dolgozataiból vesszük át, anélkül, hogy itt újból megalapoznánk, speciálisan ami az  $1/2$  faktort illeti. A két tag együtt a következőt adja:

$$H_2\psi = \frac{1}{4} \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{Ze^2}{m_0^2c^2} \frac{1}{r^3} \frac{1}{i} (\mathbf{k}_x\mathbf{s}_x + \mathbf{k}_y\mathbf{s}_y + \mathbf{k}_z\mathbf{s}_z)\psi + \mu_0(H_x\mathbf{s}_x + H_y\mathbf{s}_y + H_z\mathbf{s}_z)\psi, \quad (19)$$

ahol  $\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y, \mathbf{k}_z$  a  $\left(\frac{2\pi i}{h}\right)$ -val megszorozott pályá-impulzusmomentumhoz rendelt

$$\mathbf{k}_x = y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, \quad \mathbf{k}_y = z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, \quad \mathbf{k}_z = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \quad (20)$$

<sup>14</sup> ZS. f. Phys., i. m., vö. különösen a (2), (3), (4) egyenletekkel ebben a dolgozatban.

<sup>15</sup> L. H. Thomas, Nature **117**, 514, 1926; Phil. Mag. **3**, 1, 1927; J. Frenkel, ZS. f. Phys. **37**, 243, 1926.



operátorok rövid jelölésére szolgál. Ha végül  $s_x, s_y, s_z$  helyére behelyettesítjük a (3) alatt megadott operátorokat, úgy a (4) előírás alapján  $\psi_\alpha$ -ra és  $\psi_\beta$ -ra esetünkben a

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1)\psi_\alpha + \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{4\pi^2} \frac{Ze^2}{m_0^2 c^2} \frac{1}{r^3} [-(i\mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y)\psi_\beta - i\mathbf{k}_z\psi_\alpha] + \\ + \mu_0[(H_x - iH_y)\psi_\beta + H_z\psi_\alpha] = E\psi_\alpha, \\ (\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1)\psi_\beta + \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{4\pi^2} \frac{Ze^2}{m_0^2 c^2} \frac{1}{r^3} [(-i\mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y)\psi_\alpha + i\mathbf{k}_z\psi_\beta] + \\ + \mu_0[(H_x + iH_y)\psi_\alpha - H_z\psi_\beta] = E\psi_\beta \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

szimultán differenciálegyenleteket kapjuk; itt a  $\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1$  és  $\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y, \mathbf{k}_z$  operátorokat tehát (17), (18) és (20) adja meg. A speciális esetben ezek az egyenletek megegyeznek a Darwin<sup>16</sup> által korábban felállított egyenletekkel. Ellentétben azonban Darwinnal, ezen egyenletek forrásának a (2) felcserélési összefüggéseket, ill. az élesebb (2a) relációkat tekintjük, nem pedig azt az elképzelést, hogy a de Broglie-hullámok amplitúdói irányított mennyiségek. Megjegyzendő továbbá, hogy a (21) egyenletek a koordináta-rendszer elforgatásaival szemben invariánsak, ha a  $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$  függvényt párt az előző szakasz előírásai szerint transzformáljuk. A (21) differenciálegyenletek integrálásával nem kell foglalkoznunk, mivel az Heisenberg és Jordan módszere segítségével nehézség nélkül elvégezhető és ezen szerzők eredményeihez képest semmi újat nem ad. Még röviden megemlíti, hogy a (21) egyenletek is levezethetők variációs elvből. Minthogy azonban ez a probléma fizikai lényegébe nem nyújt új bepillantást, itt nem ismertetjük részletesen.

Amint azt már a bevezetőben említettük, az itt megfogalmazott elmélet csupán ideiglenesnek tekintendő, hiszen a végleges elmélettől meg kell kívánnunk, hogy megfogalmazása kezdettől fogva relativisztikusan invariáns legyen és hogy tegye lehetővé a magasabb rendű korrekciók kiszámítását. Mármint nem okoz nehézséget a  $s$  impulzusmomentum-vektort a négydimenziós világ (téridő) egy  $s_{ik}$  antiszimmetrikus tenzorává (hatosvektorra) kiegészíteni és ezekre Lorentz-transzformációkkal szemben invariáns felcserélési összefüggéseket felállítani, melyek (2) vagy (2a) természetes általánosításainak tekintendők. A továbbiakban azonban egy másik nehézségre bukkanunk, mely már Thomas és Frenkel fent említett, a klasszikus elektrodinamikán alapuló elméletében is fellép. Elméletünkben a magasabb közelítésekben különleges kényszererőkre van szükség annak eléréséhez, hogy abban a koordináta-rendszerben, amelyben az elektron pillanatnyilag nyugszik, elektromos dipólusmomentuma eltűnjék. Ezek a kényszererők az egymás után következő közelítésekben az elektronokra ható térerősség egyre magasabb rendű térbeli differenciálhányadosaival arányosak. Úgy látszik, hogy ez a nehézség a kvantummechanikában is fennáll, s ez okból mindeddig nem sikerült megadnom a mágneses elektron kvantummechanikájának olyan relativisztikusan invariáns megfogalmazását, amelyet minden mesterkéeltségtől mentesnek tekinthetnénk. Egyenesen kétségesnek látszik — mind a kényszererők vázolt viselkedése, mind pedig más okok folytán —, hogy az elmélet ilyen megfogalmazása lehetséges-e egyáltalán, amíg ragaszkodunk az elektronnak, mint végtelen kicsiny dipólusnak az idealizációjához (elhanyagolva

<sup>16</sup> C. G. Darwin, i. m. (3) egyenlet.



a kvadrupól- és magasabb rendű momentumokat); egy ilyen elmélet felállításához talán az elektron pontosabb modelljére van szükség. Itt azonban nem bocsátkozunk ezen még megoldatlan problémák behatóbb megtárgyalásába.

5. *Több elektron esete.* Az az eset, amikor a vizsgált mechanikai rendszer több, mondjuk  $N$  számú, sajátmomentummal rendelkező elektront tartalmaz, az általunk választott fizikai kiindulópont — azaz a sajátfüggvények módszerének használata — mellett nem jár új nehézségekkel az egyetlen elektron esetéhez képest.

Itt annak a valószínűsége után kell tudakozódnunk, hogy a rendszernek az összenergia  $E$  értékével jellemzett stacionárius állapotában az elektronok helykoordinátái meghatározott infinitezimális közökben fekszenek és ugyanakkor saját-

momentumaik komponensei az adott  $z$ -irányban, az  $\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  egységben mérve, a  $+1$  vagy a  $-1$  értéket veszik fel. Az elektronokat az  $1$ -től  $N$ -ig futó  $k$  indexszel jellemezzük, a  $k$ -adik elektron helykoordinátáit ( $x_k, y_k, z_k$  helyett) röviden  $q_k$ -val, a megfelelő infinitezimális térfogatelemet ( $dx_k dy_k dz_k$  helyett)  $dq_k$ -val jelöljük, végül pedig az  $\alpha_k$  vagy a  $\beta_k$  index segítségével tüntetjük fel, hogy a  $k$ -adik elektron sajátmomentumának  $z$ -komponense pozitív, ill. negatív. A rendszer állapotát ekkor a következő  $2^N$  függvény segítségével jellemezhetjük:

$$\begin{aligned} &\psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}(q_1 \dots q_N), \quad \psi_{\beta_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}(q_1 \dots q_N), \quad \psi_{\alpha_1 \beta_2 \alpha_3 \dots \alpha_N}(q_1 \dots q_N), \dots, \psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \beta_N}(q_1 \dots q_N), \\ &\psi_{\beta_1 \beta_2 \alpha_3 \dots \alpha_N}(q_1 \dots q_N), \dots, \psi_{\alpha_1 \dots \alpha_{N-2} \beta_{N-1} \beta_N}(q_1 \dots q_N), \\ &\dots, \psi_{\beta_1 \dots \beta_N}(q_1 \dots q_N). \end{aligned}$$

Ekkor pl.

$$|\psi_{\beta_1 \beta_2 \alpha_3 \dots \alpha_N}(q_1 \dots q_N)|^2 dq_1 \dots dq_N$$

annak valószínűségét adja meg, hogy az első elektronra  $s_z$  egyenlő  $-1$ -gyel és  $q$  a  $(q_1, q_1 + dq_1)$  közben fekszik, a második elektronra  $s_z$  egyenlő  $-1$ -gyel és  $q$  a  $(q_2, q_2 + dq_2)$  közben fekszik, a harmadik, ...,  $N$ -edik elektronra pedig  $s_z$  egyenlő  $+1$ -gyel és  $q$  a  $(q_3, q_3 + dq_3)$ , ..., ill.  $(q_N, q_N + dq_N)$  közben fekszik. Az  $\alpha_k$  vagy  $\beta_k$  indexek felírásának sorrendje közömbös; a  $q$  változók és a  $k=1, \dots, N$  index meghatározott sorrendben vonatkoznak az elektronokra. A  $k$ -adik elektron sajátmomentumának  $s_{kx}, s_{ky}, s_{kz}$  komponensei számára közvetlenül átvehetők a (3) operátorok, azzal a megállapodással, hogy ezek az operátorok a  $\psi$  függvénynek csupán ezen  $k$ -adik elektronra vonatkozó  $\alpha_k$  vagy  $\beta_k$  indexét változtathatják meg, a többi elektron  $\alpha_{k'}$  vagy  $\beta_{k'}$  indexe ( $k' \neq k$ ) azonban változatlan marad. Ekkor fennáll pl.

$$\left. \begin{aligned} s_{kx} \psi_{\alpha_1 \dots \alpha_k \dots \beta_N}(q_1 \dots q_N) &= \psi_{\alpha_1 \dots \beta_k \dots \beta_N}, & s_{kx} \psi_{\dots \beta_k \dots} &= \psi_{\dots \alpha_k \dots}, \\ s_{ky} \psi_{\dots \alpha_k \dots} &= -i \psi_{\dots \beta_k \dots}, & s_{ky} \psi_{\dots \beta_k \dots} &= i \psi_{\dots \alpha_k \dots}, \\ s_{kz} \psi_{\dots \alpha_k \dots} &= \psi_{\dots \alpha_k \dots}, & s_{kz} \psi_{\dots \beta_k \dots} &= -\psi_{\dots \beta_k \dots} \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Ha a  $p_k$  impulzus-komponensekhez — a szokás szerint — a  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$  operátort rendeljük, úgy minden egyes

$$f(p_1, \dots, p_N, \quad q_1, \dots, q_N, \quad s_{1x}, s_{1y}, s_{1z}, \dots, s_{Nx}, s_{Ny}, s_{Nz})$$



függvénynek megfelel egy

$$f\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_N}, q_1, \dots, q_N, s_{1x}, s_{1y}, s_{1z}, \dots, s_{Nx}, s_{Ny}, s_{Nz}\right)$$

operátor. Speciálisan a  $H$  Hamilton-függvény operátora, ha azt a  $2^N$  számú  $\psi$  függvényre alkalmazzuk,  $2^N$  számú szimultán differenciálegyenletet szolgáltat:

$$H\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_N}, q_1, \dots, q_N, s_{1x}, s_{1y}, s_{1z}, \dots, s_{Nx}, s_{Ny}, s_{Nz}\right)\psi_{i_1\dots i_N} = E\psi_{i_1\dots i_N} \\ (i_k = \alpha_k \text{ vagy } \beta_k). \quad (23)$$

Ha az  $n, m$  indexek különböző stacionárius állapotokra vonatkoznak, úgy érvényes az

$$\sum_{i_k = \alpha_k \text{ vagy } \beta_k} \psi_{n, i_1\dots i_N} \psi_{m, i_1\dots i_N}^* dq_1\dots dq_N = \delta_{nm} \\ (\delta_{nm} = 0, \text{ ha } n \neq m \text{ és } 1, \text{ ha } n = m) \quad (24)$$

ortogonalitási összefüggés, és minden, fent leírt fajtájú  $f$  függvénynek megfelel egy-egy

$$f_{nm} = \int \sum_{i_k = \alpha_k \text{ vagy } \beta_k} (f\psi_{m, i_1\dots i_N}) \psi_{n, i_1\dots i_N}^* dq_1\dots dq_N \quad (25)$$

mátrix. Itt  $f$  az  $f$  függvényhez tartozó, fent definiált operátor. Mind (24), mind (25) alatt az integrandusban  $2^N$  tagból álló összeg áll.

A valóságban előforduló Hamilton-függvények, továbbá mindazok az  $f$  függvények, amelyek a rendszer tényleges fizikai kölcsönhatásait írják le s amelyeknek mátrixát a fentiek szerint képezhetjük, az elektronok azonossága folytán a következő tulajdonságúak: értékük változatlan marad, ha két elektron változóját — a  $q_k$ -kat és az  $s_k$ -kat egyaránt — egymással felcseréljük; feltehetjük, hogy  $H$  és  $f$  az  $N$  számú  $(q_k, s_{kx}, s_{ky}, s_{kz})$  változó-csoport szimmetrikus függvénye. Ennek Heisenberg és Dirac szerint az a folyománya, hogy a termék különböző, egymással nem kombináló csoportokra oszlanak, amelyeket a sajátfüggvényeknek két elektron felcserélésekor mutatott szimmetria-tulajdonságai jellemeznek. Lényeges arra ügyelnünk, hogy két elektron felcserélése, mondjuk az első és a másodiké, a  $q_1, q_2$  koordináta-értékeknek, valamint az 1 és 2 elektronokhoz tartozó  $\alpha$ , ill.  $\beta$  indexeknek — azaz  $s_{z_1}$  és  $s_{z_2}$  értékeinek — felcserélését jelenti.

Speciálisan van egy szimmetrikus megoldás; ekkor bármely két  $k, j$  indexre — a többi indexhez tartozó  $q$  értékeket változatlanul hagyva — fennáll:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\dots\alpha_k\alpha_j\dots}^{\text{szimm.}}(\dots q_k\dots q_j\dots) &= \psi_{\dots\alpha_k\alpha_j\dots}^{\text{szimm.}}(\dots q_j\dots q_k\dots), \\ \psi_{\dots\alpha_k\beta_j\dots}^{\text{szimm.}}(\dots q_k\dots q_j\dots) &= \psi_{\dots\beta_k\alpha_j\dots}^{\text{szimm.}}(\dots q_j\dots q_k\dots), \\ \psi_{\dots\beta_k\beta_j\dots}^{\text{szimm.}}(\dots q_k\dots q_j\dots) &= \psi_{\dots\beta_k\beta_j\dots}^{\text{szimm.}}(\dots q_j\dots q_k\dots). \end{aligned} \right\} \quad (26)$$



Van továbbá egy antiszimmetrikus megoldás; ez bármely  $k, j$  indexpár (elektronpár) felcserélésekor előjelet vált:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\dots\alpha_k\alpha_j\dots}^{\text{antisz.}}(\dots q_k\dots q_j\dots) &= -\psi_{\dots\alpha_k\alpha_j\dots}^{\text{antisz.}}(\dots q_j\dots q_k\dots), \\ \psi_{\dots\alpha_k\beta_j\dots}^{\text{antisz.}}(\dots q_k\dots q_j\dots) &= -\psi_{\dots\beta_k\alpha_j\dots}^{\text{antisz.}}(\dots q_j\dots q_k\dots), \\ \psi_{\dots\beta_k\beta_j\dots}^{\text{antisz.}}(\dots q_k\dots q_j\dots) &= -\psi_{\dots\beta_k\beta_j\dots}^{\text{antisz.}}(\dots q_j\dots q_k\dots). \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

Ez egyszerűen abból következik, hogy a szimmetrikus  $f$  operátorok a függvényeknek, melyekre azokat alkalmazzuk, változatlanul hagyják a szimmetria-jellegét. Az, hogy a szimmetrikus és nem-szimmetrikus osztály függvényei egymással nem kombinálnak, egyszerűen következik (25)-ből.

Érdekes lenne Wigner<sup>17</sup> csoportelméleti vizsgálatait, melyeket ő  $N$  számú, sajátmomentummal nem rendelkező elektron esetére végzett el, sajátmomentummal rendelkező elektronokra is kiterjeszteni, s egyszersmind megállapítani, miképpen oszlanak el a sajátmomentum elhanyagolása mellett nyert szimmetria-osztályoknak megfelelő termék a sajátmomentummal rendelkező elektronok szimmetria-osztályaira. Két elektron esetében *csak* szimmetrikus és antiszimmetrikus osztály van, melyeket (26), (27) szerint a következő egyenletek jellemeznek:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\alpha_1\alpha_2}^{\text{szimm.}}(q_1, q_2) &= \psi_{\alpha_1\alpha_2}^{\text{szimm.}}(q_2, q_1), & \psi_{\beta_1\beta_2}^{\text{szimm.}}(q_1, q_2) &= \psi_{\beta_1\beta_2}^{\text{szimm.}}(q_2, q_1), \\ \psi_{\alpha_1\beta_2}^{\text{szimm.}}(q_1, q_2) &= \psi_{\beta_1\alpha_2}^{\text{szimm.}}(q_2, q_1), & \psi_{\beta_1\alpha_2}^{\text{szimm.}}(q_1, q_2) &= \psi_{\alpha_1\beta_2}^{\text{szimm.}}(q_2, q_1); \end{aligned} \right\} \quad (26')$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\alpha_1\alpha_2}^{\text{antisz.}}(q_1, q_2) &= -\psi_{\alpha_1\alpha_2}^{\text{antisz.}}(q_2, q_1), \\ \psi_{\beta_1\beta_2}^{\text{antisz.}}(q_1, q_2) &= -\psi_{\beta_1\beta_2}^{\text{antisz.}}(q_2, q_1), \\ \psi_{\alpha_1\beta_2}^{\text{antisz.}}(q_1, q_2) &= -\psi_{\beta_1\alpha_2}^{\text{antisz.}}(q_2, q_1), \\ \psi_{\beta_1\alpha_2}^{\text{antisz.}}(q_1, q_2) &= -\psi_{\alpha_1\beta_2}^{\text{antisz.}}(q_2, q_1). \end{aligned} \right\} \quad (27')$$

Ezzel szemben általában *nincs* egyszerű kapcsolat a  $\psi_{\alpha_1\beta_2}(q_1, q_2)$  és  $\psi_{\alpha_1\beta_2}(q_2, q_1)$  függvényértékek között; ezeknek két különböző potenciális energiájú konfiguráció felel meg. Az egyik esetben  $q_1$  annak az elektronnak a helykoordinátáit jelöli, amelyre  $s_z$  pozitív,  $q_2$  pedig azét, amelyre  $s_z$  negatív; a másik esetben — megfordítva — a tér  $q_2$  pontjában van az az elektron, amelyre  $s_z$  pozitív, a  $q_1$  pontban pedig az, amelyhez negatív  $s_z$  tartozik.

Az „ekvivalencia-szabálynak”  $N$  elektron általános esetében is az antiszimmetrikus megoldás tesz eleget; egyedül ez fordul elő a természetben.<sup>18</sup> A saját-

<sup>17</sup> E. Wigner, ZS. f. Phys. **40**, 883, 1927.

<sup>18</sup> Ezt az alkalmat felhasználva nagyon szeretném aláhúzni, hogy az antiszimmetrikus megoldás egyedüli előfordulását csak az elektronok esetében, mégpedig azok sajátmomentumának tekintetbe vétele mellett, köveleli meg a tapasztalat. Korábbi közleményemben (ZS. f. Phys. **41**, 81, 1927) a Fermi-statisztikára szintén csak az elektrongáz esetében hivatkoztam a tapasztalattal való összehasonlításakor. Másfajta statisztikák lehetősége más anyagú gázok esetében még nyitva marad; ez az említett közleményben sajnos nincs eléggé kiemelve. Vö. ezzel kapcsolatban F. Hund, ZS. f. Phys. **42**, 93, 1927.



függvények módszerének előnye a szememben, hogy ez a megoldás ilyen egyszerű módon jellemezhető és éppen ez adja meg szememben e módszer sajátmomentummal rendelkező elektronokra való kiterjesztésének jelentőségét, habár az természetesen a Heisenberg-féle mátrix-módszerekhez képest új eredményekhez nem vezethet. Ezenkívül a szingulett- és triplett-termek közötti interkombinációs vonalak intenzitásai, melyekre vonatkozóan *Ornstein és Burger*<sup>19</sup> közölt új eredményeket, ezen módszer segítségével kvantummechanikailag bizonyára áttekinthetőbben számíthatók ki.

<sup>19</sup> L. S. Ornstein és H. C. Burger, *ZS. f. Phys.* **40**, 403, 1926.



# KÖNYVISMERTETÉS

Die Werke von Jakob Bernoulli Band 1. Birkhäuser Verlag, Basel (Switzerland). 1969.

1744-ben Opera Jacob Bernoulli címen Genfben jelent meg Nikolaus Bernoulli szerkesztésében két kötetben Jakob Bernoulli munkáinak első gyűjteménye. Olyan nagy volt a sikere, hogy hamarosan újat kellett nyomtatni.

A Bázeli Természetkutató Társaság kiadásában Dr. J. O. Fleckenstein professzor szerkesztésében 5 kötetben jelenik meg a bázeli matematikus Bernoulli-dinasztiát megalapító Jakob Bernoulli (1655—1705) műveinek szövegkritikai kiadása. Az első kötet az ifjúkori műveket tartalmazza. Már ebben utalások, szerkesztő jegyzetek formájában szerepelnek szellemi örökösei: öccse és utóda Johann Bernoulli (1667—1748), ennek fia Dániel Bernoulli (1700—1782) és a két testvér unoka-öccse Niklaus Bernoulli (1687—1759).

Ez a kötet tartalmazza Jakab Bernoulli azon első munkáit, amelyek Leibnitznek 1684-ben megjelent alapvető értekezése nyomán a differenciális integrálszámításra vonatkoznak. Ugyanitt szerepelnek a matematikus Bernoullinak a csillagászatra, fizikára, logikára, módszertanra vonatkozó olyan munkái — német, latin, francia és angol nyelven — mint

Neu-erfundene Anleitung, wie man dien Lauff der Comet-oder Schwantz—Sternen . . . ;

Qomodo caecus possit doceri scribere;

Nouvelle machine pour respirer sous l'eau;

Observations of Dr. Papin, Fellow of the Royal Society . . .

A szerkesztő Jakob Bernoulli teljes munkásságának bemutatására törekszik, ezért közöl kivonatokat is különböző leveleiből, Meditationes et Annotationes című 1667-től csaknem 30 éven át vezetett naplószerű feljegyzéseiből. Ez utóbbiakat Bernoulli sajátkezű rajzai élenkítik, amelyek az egyéb, az egykori kiadások fedőlapjainak és szövegközti ábráinak, másolataival együtt tovább emelik ennek a külsejében is, tartalmában is vonzó kötetnek az értékét.

(T. Gy.)

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1969. XII. 1. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 8,75 (A/5) iv

69-7522 — Szegedi Nyomda

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181 útján eszközölhetők.)



Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26,491

## TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Abonyi Iván és Elek Gábor: Megjegyzés egy mikrofizikai modell biológiai alkalmazásához</i> . . . .	97
<i>Fényes Tibor: Az izokrón ciklotronok és alkalmazásaik</i> . . . . .	109
<i>Matolcsi Tamás és Nagy Tibor: A kemény pion módszer alkalmazása barion-mezon négy pont függvényekre</i> . . . . .	151
<i>Balla János: Nitrogénkriosztát neutronspektroszkópiai mérésekhez 80...300 K° hőmérséklet-tartományra</i> . . . . .	163

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Pauli: A mágneses elektron kvantummechanikájáról</i> . . . . .	177
--	-----

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>Die Werke von Jakob Bernoulli Band 1. (T. Gy.)</i> . . . . .	196
---	-----



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

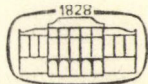
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XVIII. KÖTET

3. FÜZET



AKADEMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1970



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest, XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó Budapest, V., Alkotmány utca 21., pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egy számlaszám: 43 790 057 181 útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# NUKLEONOK EFFEKTÍV KÖLCSÖNHATÁSA VÉGTELEN MAGANYAGBAN\*

BALÁZS ERZSÉBET és KISDI DÁVID  
MTA Elméleti Fizikai Kutató Csoport, Budapest

## TARTALOMJEGYZÉK

- I. Bevezetés
- II. Ideális nukleongáz
- III. Kölcsönhatási rendszer, Goldstone-diagramok
- IV. Kis sűrűségű maganyag, Bethe—Goldstone-egyenlet
- V. Energiarenormálás, Brueckner módszer
- VI. Bethe—Goldstone-egyenlet megoldása
- VII. A Brueckner-egyenletek megoldása iterációs eljárással

## I. Bevezetés

Mindenekelőtt a címben szereplő két fogalmat, az effektív kölcsönhatás és a maganyag fogalmát kell tisztáznunk. Az effektív kölcsönhatás szemléltetésére végezzük el a következő — mindenki által jól ismert — kísérletet. Helyezzünk el vákuumban egymástól  $r$  távolságra két pontszerű elektromos töltést, melyek töltése  $e_1$ , ill.  $e_2$ . Méréseink szerint az  $e_1$ , ill.  $e_2$  töltések közötti kölcsönhatás vákuumban

$$V = \frac{e_1 \cdot e_2}{r} \quad (1.1)$$

alakban írható fel. Ugyanezen két töltést dielektrikumba helyezve és a fenti méréseket elvégezve tapasztalatunk szerint a dielektrikumban elhelyezett pontszerű elektromos töltések között

$$V_{\text{eff}} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{e_1 \cdot e_2}{r} \quad (1.2)$$

alakban felírható kölcsönhatás működik. Bármennyire is hasonló a két formula, lényeges elvi különbség van közöttük. A vákuumbeli kölcsönhatásról ma sem tudunk mást mondani, csupán azt, hogy a töltések között (1.1) alakú kölcsönhatás működik. A vákuumbeli elektromos kölcsönhatás (1.1) alatti leírása egzakt.

Nem ez a helyzet a dielektrikumra vonatkozó (1.2) képlettel. Az ott felírt kölcsönhatás egy ún. effektív kölcsönhatás, mely jó közelítéssel leírja azt, hogy a dielektrikum, amely maga is töltött részecskék — atomok, tehát végső soron elektronok és atommagok — sokasága, mint háttér, hogyan változtatja meg a szabad elektromos töltések kölcsönhatását. A dielektromos állandó magába sűríti mindazt a komplex folyamatot, mellyel a két elektromos töltés a vákuumbeli kölcsönhatáson keresztül megváltoztatja a közeg elektromos állapotát, mely változás végső soron visszahat a töltések mozgására — kölcsönhatására — is. A dielektromos állandó

\* Kisdi Dávidnak a VI. Magyar Magfizikai Nyári Iskolán (Tihany, 1969) tartott előadása alapján.



pontos kiszámításához fel kell használnunk a vákuumbeli kölcsönhatás pontos alakját és ismernünk kell a dielektrikumban végbemenő folyamatokat, de ha már a dielektromos állandót kiszámoltuk, az (1.2) formula alapján leírhatjuk a dielektrikumba ágyazott töltések kölcsönhatását úgy is, mintha környezetük szerkezetében változás nem állt volna be, csupán a köztük működő kölcsönhatás változott volna.

Lényegében hasonló problémával állunk szemben akkor is, amikor egy sok nukleonból álló rendszer két nukleonját kiragadva az azok közt működő effektív kölcsönhatást kívánjuk meghatározni. Az előbb említett példával szemben azonban még további problémák lépnek fel.

1. Mai tudásunk szerint a két nukleon között működő kölcsönhatást vákuumban sem tudjuk pontosan felírni, annyit azonban máris tudunk, hogy a magerők a Coulomb-erőnél lényegesen bonyolultabb állapotfüggő kölcsönhatásra vezetnek.

2. A nukleonok kvantummechanikai részecskék, tehát megkülönböztethetetlenek, valamint feles spinűek, tehát kölcsönhatásukat a Pauli-elv is befolyásolja.

Ezek szerint tehát a nukleonokból álló sokrészecskerendszer tanulmányozásánál szükségképpen támaszkodnunk kell a kvantummechanikai soktestprobléma eredményeire. Továbbá tisztában kell lennünk azzal, hogy az effektív kölcsönhatás még akkor is állapotfüggő lenne, ha a vákuumbeli kölcsönhatás nem volna az. Ugyanis erősen függeni fog attól, hogy nukleonjaink milyen nukleonrendszer belsejében vannak. Valójában minden egyes izotópban más és más lesz az effektív kölcsönhatás, melyek részletes tárgyalása már nem tartozik ezen előadás kereteibe.

Mi egy hipotetikus nukleonrendszerben, az ún. maganyagban fogjuk vizsgálni a két nukleon effektív kölcsönhatását. A végtelen maganyagot a következő tulajdonságok jellemzik: ha  $N$  a neutronok,  $Z$  pedig a protonok száma, feltesszük, hogy maganyagban  $N=Z$ . Az összes nukleonok száma  $A$  ( $A = N + Z$ ), és felteszszük, hogy  $A$  nagyon nagy,  $A \rightarrow \infty$ . Továbbá a maganyagbeli protonok közti Coulomb kölcsönhatást kikapcsoljuk. Ezen utóbbi feltevést az teszi szükségessé, hogy a természetben  $Z > 100$  rendszámú mag nincs, mivel a köztük fellépő Coulomb kölcsönhatás szétrepíti a magot. Ugyanakkor célunk viszont az, hogy a maganyagra végzett számítások eredményeit a nehéz magokra kapott kísérleti eredmények extrapolált értékeivel összevessük.

Feltételezzük még azt is, hogy a rendszer térfogata igen nagy. Ezen a következőt értjük: Legyen az  $A$  nukleonból álló rendszer térfogata  $\Omega$ . A rendszer energiája a tömegszám és a térfogat függvénye lesz,  $E(A, \Omega)$ -val jelöljük. Ha  $\lambda$  darab ilyen nukleonrendszert egyetlen  $\lambda\Omega$  térfogatú,  $\lambda A$  nukleont tartalmazó rendszerre egyesítünk, és az egyesítéskor fellépő felületi effektusok járuléka az összenergia értékét nem befolyásolják, azaz

$$E(\lambda\Omega, \lambda A) = \lambda E(A, \Omega) \quad (1.3)$$

akkor a rendszer  $\Omega$  térfogatát nagynak nevezzük.

Az (1.3) függvényegyenletnek egyetlen megoldása van,

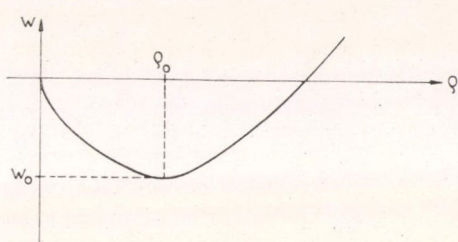
$$E(A, \Omega) = A w \left( \frac{A}{\Omega} \right), \quad (1.4)$$

ahol a még egyelőre ismeretlen  $w$ -t a nukleonok közötti kölcsönhatás fogja meghatározni. Bevezetve a  $\varrho = \frac{A}{\Omega}$  maganyagsűrűséget (1.4)-ből látható, hogy az egy nukleonra jutó energia ( $w$ ) egyetlen paraméternek,  $\varrho$ -nak függvénye.

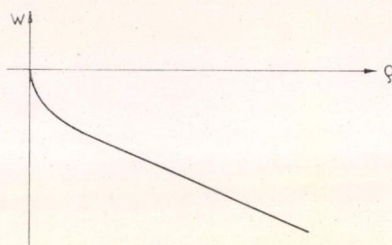


Feladatunkat most már a következőképpen is megfogalmazhatjuk. Feltéve, hogy a szabad nukleonok kölcsönhatását ismerjük, meghatározzuk a — későbbiek során ismertetett soktestproblémai módszerrel — az effektív kölcsönhatást, és a maganyag egy nukleonjára eső energiáját. Hogy az így meghatározott effektív kölcsönhatás „igazi”-e, eldönthető oly módon, hogy különböző magsűrűségekkel mint paraméterrel kiszámítjuk  $w$  értékét, és összevetjük a nehéz magokra végzett kísérletek extrapolált eredményeivel.

A maganyag energiáját a sűrűség függvényében felrajzolva (1. ábra) látható, hogy a görbe jól meghatározott minimummal rendelkezik. Ebből arra következtet-



1. ábra



2. ábra

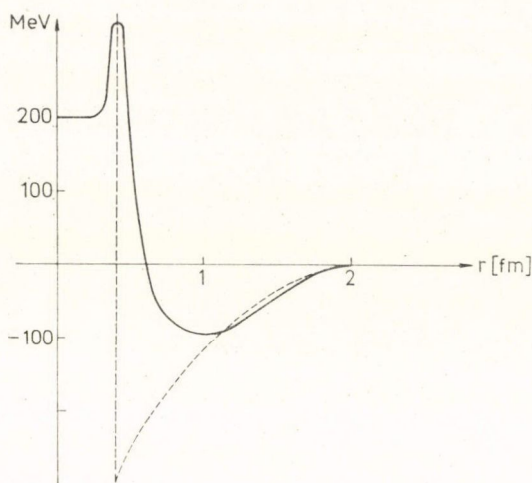
hetünk, hogy a nukleáris kölcsönhatás telített. Telített kölcsönhatás működik pl. a folyadékok, és a fémek részecskéi között is,  $w(\rho)$  függvényük szintén az 1. ábrához hasonló alakú. (Megjegyezzük, hogy nem minden kölcsönhatás vezet telítettségre, a gravitációs energia pl.  $\rho$  függvényében monoton csökken (2. ábra), legmélyebb energiájú a gravitációs rendszer végtelen anyagsűrűségénél. Ezt a jelenséget nevezzük gravitációs kollapszusnak.)

A magfizika kezdeti szakaszában a legnagyobb nehézséget az okozta, hogy — mivel a magerőknek csak a hosszú hatótávolságú vonzó részét ismerték többé-kevésbé — nem tudták reprodukálni az energiagörbe telítettségre utaló minimumát, a magok összeroppanására, kollapszusára vezető magerőket ismertek csupán. Csak az utóbbi évtizedben a nagyenergiás szórás kísérletek eredményei birtokában — az igen nagy, de rövid hatótávolságú taszító törzs megismerésével, valamint az ezen előadás tárgyát képező soktestprobléma matematikai módszerének kidolgozásával — sikerült számításokkal is reprodukálni a telítettségre utaló energia-sűrűség görbét.

Az 1. ábrán látható minimumhelyhez tartozó  $w_0$  és  $\rho_0$  értékeket a kísérletekből extrapolálva szeretnénk megadni, és ezek után megköveteljük, hogy a maganyagra végzett számítások eredményeként adódó  $w$  görbe a  $\rho_0$  helyen a  $w_0$  értéket vegye fel.

$w_0$  értékét a félempirikus tömegformulából határozhatjuk meg, figyelembe véve, hogy a maganyagban a felületi effektusokat és a Coulomb kölcsönhatást elhanyagoltuk, továbbá, hogy a neutronok és protonok száma megegyezik. Így a félempirikus tömegformulának csupán  $A$ -val arányos tagja marad meg, melynek együtt-hatóját  $w_0$ -lal azonosítjuk. Empirikus értéke  $w_0 = -16$  MeV. Az egyensúlyi maganyagsűrűség értékét pedig megkapjuk, ha a fentiek értelmében véges, de nagy tömegszámú magban a felület sűrűség-növelő, és a Coulomb kölcsönhatás sűrűség-csökkentő hatását elhanyagoljuk. Még néhány más effektust is figyelembe véve *Brandow* 1964-ben az egyensúlyi maganyagsűrűségre  $\rho_0 = 0,170 \text{ fm}^{-3}$  értéket adott meg.





3. ábra

A 3. ábrán *Brandow* számításai alapján látható a  ${}^3S_1$  relatív impulzummomentumú,  $p = 1 \text{ fm}^{-1}$  relatív impulzusú nukleonok között  $\rho_0$  sűrűségű maganyagban fellépő effektív kölcsönhatás, melyet a következőképpen adhatunk meg:

$$g = \begin{cases} \text{konst}, & r < c \\ \text{konst} \cdot \delta(r - c), & r \sim c \\ g(r), & r > c \end{cases} \quad (1.5)$$

Az ábrán az összehasonlítás kedvéért feltüntettük a vákuumbeli  $v(r)$  kölcsönhatást is. Jól látható, hogy a két kölcsönhatás a  $(0, 1 \text{ fm})$  tartományban drasztikusan eltér.

Mielőtt rátérnénk a részletes tárgyalásra, megemlítjük, hogy a továbbiakban a következő egységrendszerben dolgozunk:

távolságot fermiben, energiát MeV-ben, időt pedig olyan egységben mérjük, hogy  $\hbar = 1$  legyen. A lezármaztatott mennyiségek közül leggyakrabban használt az impulzus, egysége  $\text{fm}^{-1}$ , valamint a tömeg, egysége  $\text{MeV}^{-1}\text{fm}^{-2}$ . A nukleon tömege  $0,0241 \text{ MeV}^{-1}\text{fm}^{-2}$ . Formuláinkban gyakran előfordul:  $\frac{1}{2M} = 20,8 \text{ MeV fm}^2$ .

## II. Ideális nukleongáz

Ideális nukleongáznak nevezzük azt a nukleonrendszert, melyben az egyes nukleonok között kölcsönhatás nincs. Vizsgálata számunkra azért érdekes, mert ismeretével szemléletes vonatkoztatási rendszerhez jutunk. A későbbiek során bekapcsolt kölcsönhatás okozta változásokat a maganyag szerkezetében mindig a kölcsönhatásmentes nukleongázra vonatkoztatjuk.

Ideális, (kölcsönhatásmentes) kvantummechanikai rendszer részecskéinek állapotfüggvénye síkhullám. Legyen tehát a  $\bar{p}$  impulzushoz tartozó síkhullám a következő alakú:

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\bar{p}\bar{r}} \chi_s(\sigma) \omega_t(\tau), \quad (2.1)$$

ahol  $x$ -szel a nukleon  $\bar{r}$  helyvektorát,  $\sigma$  spin-,  $\tau$  izospinváltozóját,  $p$ -vel pedig a  $\bar{p}$  impulzus-,  $s$  spin-,  $t$  izospin-kvantumszámokat jelöltük.

Legyen az ideális nukleongázban az  $A$  darab nukleon a  $p_1, p_2, \dots, p_A$  kvantumszámokkal jellemzett állapotokban. Ekkor a teljes rendszer állapotfüggvénye

$$\Phi(x_1, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \varphi_{p_1}(x_1) & \dots & \varphi_{p_A}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{p_1}(x_A) & \dots & \varphi_{p_A}(x_A) \end{vmatrix}, \quad (2.2)$$



energiája pedig az egyes nukleonok  $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2M}$  energiájának összege,

$$E = \sum_{i=1}^A \varepsilon_{p_i} \quad (2.3)$$

lesz. (Megjegyezzük, hogy a  $\Phi(x_1, \dots, x_A)$  teljesen antiszimmetrikus állapotfüggvényben szereplő  $\varphi_{p_i}(x_k)$  egyrészecske állapotfüggvények a szabad nukleon Hamilton-operátorának teljes rendszerét alkotják, és feltesszük, hogy  $\Phi$  nemdegenerált állapot.)

Ideális nukleongáz alapállapotáról akkor beszélünk, ha az  $A$  darab nukleon rendre betölti a rendelkezésére álló legmélyebb impulzusú állapotokat egy meghatározott  $p_{\max} = k_F$  impulzusig, és a  $p > k_F$  impulzusokhoz tartozó állapotok mind üresek. Az impulzustérben ezen alapállapotot egy  $k_F$  sugarú gömb, az ún. Fermi-gömb reprezentálja. Az alapállapot hullámfüggvénye tehát olyan síkhullámokból épül fel, melyekhez tartozó  $p \leq k_F$ .

Célszerű megállapodnunk a következő jelölésekben: A továbbiakban  $k, l, m, \dots$  betűkkel jelöljük azon állapotok kvantumszámait, melyek impulzusa kisebb vagy egyenlő a Fermi-gömb sugarával,  $a, b, c, \dots$  betűkkel pedig azon állapotokat jelöljük, melyek impulzusa a Fermi-gömb sugarán kívül esik. Az ABC utolsó harmadának betűit (pl.  $p, q, r, \dots$ ) azon állapotok kvantumszámainak jelölésére használjuk, melyeknél nem tudjuk előre, hogy impulzusuk mekkora.

Fejezzük ki az alapállapotban levő ideális nukleongáz tömegszámát a Fermi-gömb sugarával:

$$A = \sum_k 1 = 4 \sum_{\vec{k}} 1 = 4 \frac{\Omega}{2\pi^3} \int d\vec{k} = 4 \frac{\Omega}{2\pi^3} \cdot \frac{4\pi}{3} k_F^3 = \frac{2\Omega}{3\pi^2} k_F^3, \quad (2.4)$$

ahol az összegzőindexet előző megállapodásunk értelmében választottuk, és kihasználtuk, hogy azonos impulzuskvantumszámmal jellemzett állapot a spin és izospin szabadsági fokokat tekintetbe véve négyszeresen betöltött. Tudjuk továbbá, hogy periodikus határfeltétel esetén az impulzus megengedett értékei

$$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z) = \frac{2\pi}{\Omega^{1/3}} (n_x, n_y, n_z) \quad (2.5)$$

alakban írhatók, ahol  $n_x, n_y, n_z$  egész számok. Ha a rendszer térfogata nagyon nagy, az egyes kvantumszámok az impulzustérben sűrűn helyezkednek el, ez lehetővé teszi számukra, hogy az impulzusokra való összegzés helyett határátmenetben integrálásra térjünk.

(2.4)-ből  $k_F$ -et kifejezve a

$$k_F = \left( \frac{3\pi^2}{2} \right)^{1/3} \left( \frac{A}{\Omega} \right)^{1/3} = \left( \frac{3\pi^2}{2} \right)^{1/3} \varrho^{1/3} \quad (2.6)$$

összefüggésre jutunk, mely kapcsolatot ad a Fermi-impulzus és az ideális nukleongáz sűrűsége között.



Definiáljuk az egy nukleonra jutó térfogat sugarát,  $r_0$ -t a következő kifejezéssel:

$$\frac{4\pi r_0^3}{3} = \frac{1}{\varrho}$$

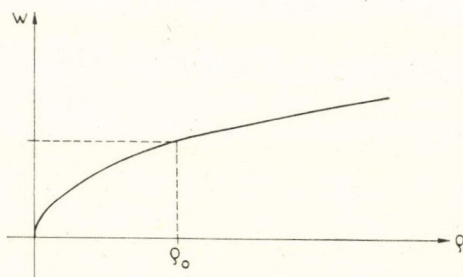
melyet (2.6)-ba helyettesítve  $k_F = \frac{1,52}{r_0}$  összefüggésre jutunk.

Végezetül számítsuk ki az ideális nukleongáz energiáját:

$$E = \sum_k \frac{k^2}{2M} = 4 \sum_k \frac{k^2}{2M} = 4 \frac{\Omega}{2\pi^3} \int_0^{k_F} \frac{k^2}{2M} 4\pi k^2 dk = \frac{3}{5} A \frac{k_F^2}{2M}. \quad (2.7)$$

Innen az egy nukleonra jutó energia:

$$w = \frac{E}{A} = \frac{3}{5} \frac{k_F^2}{2M} = \frac{3}{10M} \left( \frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \varrho^{2/3}. \quad (2.8)$$



4. ábra

Az így kapott  $w$ -t  $\varrho$  függvényeként ábrázolva (4. ábra) a következőket állapíthatjuk meg:

1. Az energiasűrűség mindig pozitív, nincs kötés.

2. Nincs telítettség, az ideális nukleongáz legmélyebb energiájú  $\varrho=0$  értéknél.

3. Az egyensúlyi magsűrűségnél ( $\varrho_0=0,17 \text{ fm}^{-3}$ )  $k_F=1,34 \text{ fm}^{-1}$ , azaz  $w=24 \text{ MeV}$ . A tapasztalat szerint viszont ebben a pontban  $w=-16 \text{ MeV}$  értéket kellene kapnunk. Tehát a potenciális energia járuléka  $\sim 40 \text{ MeV}$ . Ez azt jelenti, hogy a kölcsönhatási energia meghatározására olyan módszert kell kidolgoznunk, amely 2–3% pontossággal képes megadni a potenciális energia értékét, hiszen a teljes energia meghatározásánál kb. 1 MeV pontosságot kívánunk.

### III. Kölcsönhatási rendszer, Goldstone diagrammok

Ebben a fejezetben olyan módszert dolgozunk ki, mely alkalmas lesz arra, hogy a II. fejezet végén kívánt pontossággal (természetesen a szabad nukleonok kölcsönhatásának ismeretében) meghatározzuk a maganyag energiáját.

Kiindulásként tekintsük az  $A$  nukleonból álló maganyag teljes Hamilton-operátorát:

$$H = \sum_{i=1}^A \left( -\frac{1}{2M} \Delta_i \right) + \sum_{i < j=1}^A v(x_i, x_j) = H_0 + V, \quad (3.1)$$

ahol  $v(x_i, x_j)$  az  $x_i$  ill.  $x_j$  koordinátákkal jellemzett nukleonok közötti kölcsönhatás vákuumban.

Látható, hogy a (3.1)-ben felírt teljes Hamilton operátor első tagja a II. fejezet-



ben megtárgyalt  $H_0$  operátor, a második, kölcsönhatási tagot perturbációként fogjuk figyelembe venni.

A  $H_0$  operátor sajátértékproblémája megoldott, ismerjük a  $\Phi_x$  sajátfüggvényeket. Ezek éppen az előző fejezetben megismert egyrészecske síkhullámokból felépített Slater-determinánsok (l. (2.2)).

### Másodkvantálás

Célszerű az eddigi koordinátareprezentációról áttérni a másodkvantált formalizmusra. Legyenek a  $p_1, \dots, p_A$  kvantumszámú állapotok betöltve. Az ezen állapothoz tartozó állapotfüggvény koordinátareprezentációban

$$\Phi(x_1, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \text{Det} \|\varphi_{p_i}(x_j)\|$$

alakú volt, ahol  $i, j = 1, \dots, A$ .

Ugyanezen állapotot jellemezhetjük oly módon is, hogy megadjuk az egyes  $p$  állapotok betöltési számát  $N_p$ -t, azaz ha pl.  $\Phi$  a  $p_i$  állapothoz tartozó síkhullámot tartalmazza, a  $p_i$  állapot betöltési száma 1, ha a  $\varphi_{p_i}$  állapotfüggvény nincs  $\Phi$ -ben, a betöltési szám zérus. Megállapodva abban, hogy a  $p_i$  állapotokat ( $i = 1, \dots, \infty$ ) milyen sorrendben írjuk a  $\Phi = |\dots p_i \dots\rangle$  vektorba, elegendő ezen vektorba az egyes állapotok helyére csupán a betöltési számot írni. Célszerű az ideális nukleongáz alapállapotát,  $\Phi_0$ -t a következőképpen jelölni:

$$\Phi_0 = | \underbrace{1, \dots, 1}_{\bar{p} \leq k_F}, \underbrace{0, \dots}_{\bar{p} > k_F} \rangle. \quad (3.2)$$

Vezessük be a  $p$  állapothoz tartozó  $a_p, a_p^+$  abszorpciós és emissziós operátorokat a következő definícióval:

$$a_p |\dots, N_p, \dots\rangle = (-1)^{s_p} \sqrt{N_p} |\dots, N_p - 1, \dots\rangle, \quad (3.3)$$

$$a_p^+ |\dots, N_p, \dots\rangle = (-1)^{s_p} \sqrt{1 - N_p} |\dots, N_p + 1, \dots\rangle,$$

ahol  $s_p$  a  $p$ -edik állapotig betöltött állapotok száma. Ezek az operátorok a következő csererelációkat elégítik ki:

$$a_p a_q^+ + a_q^+ a_p = \delta_{pq}, \quad a_p a_q + a_q a_p = 0, \quad a_p^+ a_q^+ + a_q^+ a_p^+ = 0. \quad (3.4)$$

A (3.3) definícióból látható, hogy amennyiben  $\Phi$ -ben  $N_p = 1$ , akkor az  $a_p$  abszorpciós operátor  $N_p = 0$ -s állapotot állít elő, azaz  $p$  állapotú részecskét abszorbeál, ha viszont  $N_p = 0$ , akkor  $a_p \Phi = 0$ . Tehát, ha az állapot nincs betöltve, úgy belőle részecskét abszorbeálni nem lehet. Az emissziós operátor hatása éppen ellenkező, ha  $N_p = 1$ ,  $a_p^+ \Phi = 0$ , és  $N_p = 0$  esetén a  $p$  állapot betöltési számát  $N_p = 1$ -re változtatja,  $p$  állapotú részecskét emittál.

Ezen abszorpciós és emissziós operátorok segítségével az összes fizikai mennyiség operátora kifejezhető, pl.

$$H_0 = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p, \quad (3.5)$$

$$V = \sum_{pqrs} \langle pq | v | rs \rangle a_p^+ a_q^+ a_s a_r,$$



ahol

$$\langle pq|v|rs\rangle = \int \varphi_p^*(x_1) \varphi_q^*(x_2) v(x_1, x_2) \varphi_r(x_1) \varphi_s(x_2) dx_1 dx_2, \quad (3.6)$$

(itt az  $x$  szerinti integrálás a térkoordinátákra való integrálást, valamint a spin-, és izospinváltozókra való összegzést jelenti).

Vegyük észre, hogy

$$\langle pq|v|rs\rangle = \langle qp|v|sr\rangle \quad (3.7)$$

mivel a  $v(x_1, x_2)$  kétrészecske kölcsönhatástól megköveteljük, hogy az  $x_1 \leftrightarrow x_2$  változócserevel szemben invariáns legyen (a részecskék megkülönböztethetetlenek), és így a (3.6) alatt részletesen kiírt mátrixelem az  $x_1, x_2$  változókban teljesen szimmetrikussá válik. Ezek szerint, amikor a  $V$  kölcsönhatási operátor (3.5) alakjában az összegzést elvégezzük, nem az összes kvantumállapotra, hanem az egymástól különböző mátrixelemekre kell összegeznünk.

### Schrödinger-féle perturbációs sor

Mint már említettük, a  $H_0$  operátor sajátértékproblémája megoldott, azaz ismerjük az  $E_0$  alapállapot energiához tartozó  $\Phi_0$ , valamint az  $E_\alpha$  gerjesztett energiákhoz tartozó  $\Phi_\alpha$  állapotfüggvényeket.

Írjuk fel a jól ismert Schrödinger-féle perturbációs sort:

$$\begin{aligned} E = E_0 &+ \langle \Phi_0 | V | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-1} P V | \Phi_0 \rangle + \\ &+ \langle \Phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-1} P V (E_0 - H_0)^{-1} P V | \Phi_0 \rangle - \\ &- \langle \Phi_0 | V | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-2} P V | \Phi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (3.8)$$

ahol a  $P = 1 - |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0|$  projekciós operátor a  $H_0$  operátor teljes Hilbert terének  $\Phi_0$  vektorra merőleges részére proiciál.

Megjegyezzük, hogy — bár a (3.8) sor felírásához látszólag elegendő  $\Phi_0$  ismerete — az  $(E_0 - H_0)^{-n}$  inverz operátorok fellépése miatt ismernünk kell a teljes  $\Phi_\alpha$  függvényrendszert.

A (3.8) sorfejtésnél az energiát a perturbáló operátor hatványai szerint fejtettük ki. Ha a kölcsönhatás gyenge (pl. elektromágneses kölcsönhatás), elegendő kiszámítani a sor első néhány tagját, biztosak lehetünk abban, hogy az összes többi, elhagyott tag járuléka kicsiny korrekciót ad csupán. Ezzel szemben nukleáris kölcsönhatás esetén a sor ilyen megszakítása nem lehetséges, feladatunk az lesz, hogy egy gondosan kiválasztott végtelen részsorozatot próbálunk felösszegezni, bízva abban, hogy az elhagyott részsorozatok járuléka már valóban kicsi.

### Gráftechnika

Vegyük sorra a (3.8) alatt felírt perturbációs sor egyes tagjait. Az  $E_0$  perturbálatlan energiát a II. fejezetben meghatároztuk, az eredményt (2.7) alatt írtuk fel. A  $V$  kölcsönhatási operátor másodkvantált alakját a (3.5) kifejezés adja meg.

Először írjuk fel a másodrendű tag,  $\langle \Phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-1} P V | \Phi_0 \rangle$  járulékát. Kiindulunk az alapállapot  $\Phi_0$  Slater-determinánsából. A  $V$  kölcsönhatási operátorban az abszorpciós operátorok indexe feltétlen  $l, m$  kell legyen, mivel csak Fermi-gömbön



belüli állapotból abszorbeálhat részecskét. A  $V$ -t követő  $P$  operátor biztosítja azt, hogy csak olyan tagok adnak járulékot, melyekben a  $V$  operátorban levő emissziós operátorok Fermi-gömbön kívüli, (alapállapotra ortogonális) állapotba emittálnak nukleonokat. Az elmondottak értelmében tehát

$$|\Phi\rangle = PV|\Phi_0\rangle = \langle ab|v|lm\rangle a_a^+ a_b^+ a_m a_l |\Phi_0\rangle \quad (3.9)$$

lesz a kölcsönhatás utáni Slater-determináns alakja.

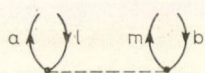
Megállapodva abban, hogy az üres papír jelképezi referenciarendszerünket (a  $\Phi_0$  perturbálatlan alapállapotot), a Slater determináns fenti változását a következő szabályok segítségével rajzolhatjuk le (5. ábra):

1. felfelé mutató nyíl = részecske a Fermi-nívó felett  
lefelé mutató nyíl = lyuk a Fermi-nívó alatt
2. A kölcsönhatást szaggatott vonal jelzi, minden szaggatott vonalhoz négy részecske -(lyuk) vonal csatlakozik, valamint tartozik egy  
 $\langle \text{left out, right out} | v | \text{left in, right in} \rangle$  szorzótényező.

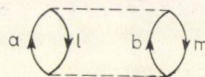
A mátrixelem (3.6) alatt felírt alakjából látszik, hogy a szaggatott vonal bal oldalát  $x_1$ , jobb oldalát pedig  $x_2$  koordináta jellemzi.

Tehát a (3.9) alatt felírt Slater-determinánsunk a referenciarendszerhez képest az 5. ábrán látható módon ábrázolható.

A másodrendű tagban jobbról balra haladva következő lépésként kiszámítjuk az energianevező hatását. A  $H_0$  kinetikus energia operátorának sajátértéke a (3.9) Slater determináns (mint sajátfüggvény) esetén az  $E_0$  sajátértéktől csupán a keltett



5. ábra



6. ábra

két részecske és a két lyuk kinetikus energiájában tér el. Eszerint tehát az energianevező

$$(H_0 - E_0)^{-1} = (\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^{-1}. \quad (3.10)$$

3. Energianevező = részecske energiák mínusz lyuk energiák.

Továbbhaladva a másodrendű tagban az újabb  $V$  kölcsönhatásnak most már az eredeti  $\Phi_0$  állapotba kell visszavinnie a  $\Phi$  közbenső állapotot. Megismételve a (3.9) egyenlet felírása előtti gondolatmenetet, nyilvánvaló, hogy ezt pl. az  $\langle lm|v|ab\rangle a_l^+ a_m^+ a_b a_a$  kölcsönhatási operátorral tudjuk elérni. A másodrendű kölcsönhatási tag képét a fentiek értelmében a 6. ábra szerint rajzolhatjuk.

A 6. ábrán látható másodrendű gráf járulékanak számértéke most már összegezve az összes  $a, b, l, m$  állapotokra:

$$-\sum_{ablm} \frac{\langle lm|v|ab\rangle \langle ab|v|lm\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m} \langle \Phi_0 | a_l^+ a_m^+ a_b a_a a_a^+ a_b^+ a_m a_l | \Phi_0 \rangle, \quad (3.11)$$



ahol  $\langle \Phi_0 | a_l^+ a_m^+ a_b a_a a_a^+ a_b^+ a_m a_l | \Phi_0 \rangle$  értéke  $\pm 1$  attól függően, hogy pontosan milyen sorrendben követik egymást az antikommutáló abszorpciós és emissziós operátorok. Az összegzés előtti mínusz jel azért lép fel, mert az energianevezőbe  $(E_0 - H_0)^{-1}$  helyett  $(H_0 - E_0)^{-1}$  értéket írtuk.

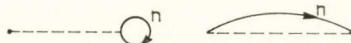
4. A járulék előjele  $= (-1)^{e+h+l}$   
 ahol  $e$  = energianevezők száma  
 $h$  = hurkok száma  
 $l$  = lyukvonalak száma

A 6. ábrán látható diagram járuléka tehát

$$-\frac{1}{2} \sum_{ab} \sum_{lm} \langle lm | v | ab \rangle (\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^{-1} \langle ab | v | lm \rangle, \quad (3.12)$$

ahol az  $1/2$  szorzó a járulék  $l \leftrightarrow m$ ,  $a \leftrightarrow b$  változókbeli szimmetriája miatt lép fel (vö. (3.7) egyenlőség után elmondottakat).

5. a) Minden gráf a  $\Phi_0$  alapállapotból indul ki és azzal is végződik, ugyanakkor egyetlen köz-belső állapot sem lehet  $\Phi_0$ . Ezt a perturbációs sor egyes tagjaiban rendre fellépő  $P$  projekciós operátor tiltja.  
 b) Egyazon  $v$  kölcsönhatáson belül csak lyukvonal lehet



- c) A kölcsönhatási vonalakat jobbra-balra csúsztatva a gráf járuléka értéké nem változik, hasonlóan a részecske- valamint lyukvonalak betűzése is tetszőleges (összegző index).

Végezetül leszögezzük, hogy a perturbációs sor minden egyes tagjának megfelel egy gráf, és minden gráfnak megfelel a perturbációs sor egy tagja.

#### Példák harmadrendű gráfokra

Írjuk fel a 7. ábrán látható 4 harmadrendű gráf járulékát

$$a) \sum_{abc} \sum_{lmn} \frac{\langle ln | v | ca \rangle \langle cm | v | bn \rangle \langle ab | v | lm \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_c - \varepsilon_l - \varepsilon_n)(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)} \quad (3.13)$$

$$b) \frac{1}{2} \sum_{abcd} \sum_{lm} \frac{\langle lm | v | cd \rangle \langle cd | v | ab \rangle \langle ab | v | lm \rangle}{(\varepsilon_c + \varepsilon_d - \varepsilon_l - \varepsilon_m)(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)} \quad (3.14)$$

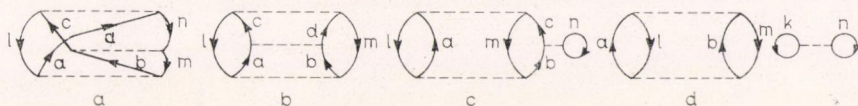
$$c) \sum_{abc} \sum_{lmn} \frac{\langle lm | v | ac \rangle \langle cn | v | bn \rangle \langle ab | v | lm \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_c - \varepsilon_l - \varepsilon_n)(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)} \quad (3.15)$$

$$d) \frac{1}{4} \sum_{ablm} \sum_{kn} \frac{\langle lm | v | ab \rangle \langle kn | v | kn \rangle \langle ab | v | lm \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^2} \quad (3.16)$$



Az itt felsorolt gráfokból az  $a), b), c)$ -vel jelletteket összefüggő, a  $d)$ -vel jelzettet széteső gráfnak nevezzük.

A 7. ábrán látható harmadrendű gráfok mind a (3.8) perturbációs sor harmadrendű tagjának első,  $\langle \Phi_0 | V(E_0 - H_0)^{-1} P V(E_0 - H_0)^{-1} P V | \Phi_0 \rangle$  tagjához adnak járulékot. A  $d)$  típusú, széteső gráf fellépése rendkívül kellemetlen következményekkel



7. ábra

járhat. Ugyanis, mint azt az I. fejezetben láttuk, nagy tömegszámú rendszer esetén az energia az  $A$  tömegszámmal arányos kell legyen. A széteső gráfok pedig (l. *Brandow*, *Rev. Mod. Phys.*, 39, 771, 1967)  $A^k$ -val arányos energijárulékot adnak, ha a gráf  $k$  darabra esik szét.

Szerencsére, ha kiszámítjuk a harmadrendű tag második részének,  $\langle \Phi_0 | V | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | V(E_0 - H_0)^{-2} P V | \Phi_0 \rangle$ -nak járulékát, rögtön látható, hogy járuléka a harmadrendű széteső gráf járulékát kiejti. Hasonlóan belátható lenne, hogy a negyed-, ötöd-, stb. rendű széteső gráfok rendre kiesnek. *Goldstone* teljes általánosságban bizonyította, hogy a perturbációs sorban tetszőleges rendben a széteső gráfok járuléka kiesnek. A Goldstone-tétel birtokában jutunk az energia ún. Goldstone-féle sorfejtéséhez,

$$E = E_0 + \text{az összefüggő gráfok járulékának összege} \quad (3.17)$$

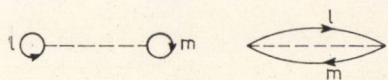
azaz a potenciális energia meghatározásához ki kell számítanunk a perturbációs sorban fellépő összes összefüggő gráf járulékának összegét.

A gráftechnika megismerésével nem csupán egy hasznos mnemotechnikai segédeszközhöz jutottunk. A gráfok tényleges fizikai folyamatok képei, ahogy az elektrodinamikában az erőteret erővonalakkal szemléltettük, úgy esetünkben a gráfok a nukleonok kölcsönhatási folyamatainak képei.

#### A végtelen maganyag számításánál fellépő gráfok

Alkalmazzuk most rendre a gráftechnika szabályait a perturbációs sor egyes tagjai járulékának kiszámítására.

A  $\langle \Phi_0 | V | \Phi_0 \rangle$  elsőrendű taghoz a 8. ábrán látható gráfok adnak járulékot, melyet kiszámítva a potenciális energia elsőrendű közelítésére a következő kifejezést nyerjük:



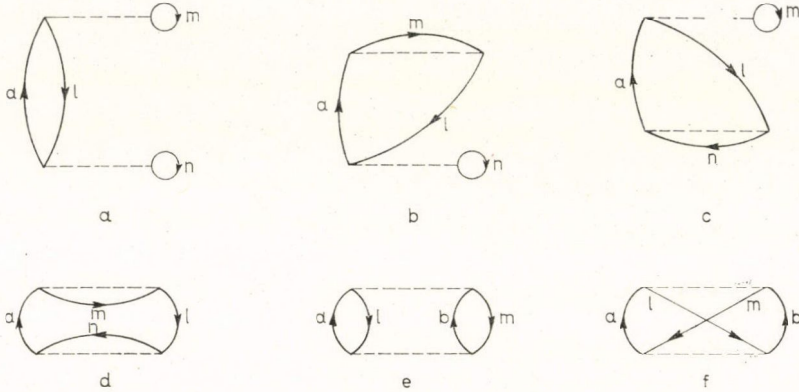
8. ábra

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | v | lm \rangle - \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | v | ml \rangle. \quad (3.18)$$

A másodrendű tag gráfjait a 9. ábrán láthatjuk. Mielőtt hozzálátnánk, hogy rendre kiszámítsuk mind a hat gráf járulékát, gondoljuk meg a következőket. Az eddig elmondottak (perturbációs sorfejtés, gráftechnika szabályai) érvényesek minden olyan rendszerre, melyet a soktestprobléma módszerével tárgyalhatunk. Az  $a, b, l$ ,



$m$  kvantumszámok pl. véges magok esetén a problémához jobban igazodó impulzusmomentum, stb., kvantumszámok együttesét jelentik. Ugyanakkor végtelen maganyagban a nukleonok impulzus sajátállapotban vannak, természetes tehát, hogy jellemzésükre a fenti kvantumszámok együttesen az impulzus, spin és izospin kvantumszámokat foglalják össze.



9. ábra

A végtelen maganyagban a  $v(x_1, x_2)$  kétrészecskékölcsönhatás transláció-invariáns, azaz a kölcsönható részecskék összimpulzusát nem képes megváltoztatni. Ez azt jelenti, hogy a  $\langle pq|v|rs \rangle$  mátrixelemet jelképező

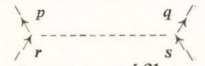


diagram mellett egy  $\delta(\bar{p} + \bar{q} - \bar{r} - \bar{s})$  szorzó jelenik meg. Ez természetesen a gráfban fellépő összes kölcsönhatási vonalra külön-külön igaz.

A maganyag energiájának számításánál tehát először meg kell vizsgálnunk, mely gráfok teljesítik az impulzusmegmaradás tételét. Az  $a)$  típusú (9. ábra) gráfnál pl. teljesülnie kell az  $\bar{a} + \bar{m} = \bar{l} + \bar{n}$ , valamint  $\bar{l} + \bar{n} = \bar{a} + \bar{m}$  egyenlőségeknek. Nyilvánvaló, hogy az ezekből következő  $\bar{a} = \bar{l}$  egyenlőség nem állhat fenn, mivel  $\bar{l} \leq k_F$ ,  $\bar{a} > k_F$ . Ezen gráf járuléka maganyag esetén tehát zérus. Hasonlóan beláthatjuk, hogy a  $b)$ ,  $c)$  és  $d)$  típusú gráfok járuléka is zérus. Még egyszer hangsúlyozzuk, hogy ez csak végtelen maganyagra igaz, pl. kvantumkémiai számításoknál mind a hat gráf járulékát figyelembe kell venni.

A potenciális energia másodrendű közelítése maganyagnál tehát az  $e)$  és  $f)$  gráfokból adódik, és

$$E^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{ab} \frac{\langle lm|v|ab \rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m} [\langle ab|v|lm \rangle - \langle ab|v|ml \rangle] \quad (3.19)$$

alakban írható. Bevezetve az

$$\langle ab|v|lm \rangle - \langle ab|v|ml \rangle \equiv \langle ab|v|lm - ml \rangle$$

rövidítő jelölést,

$$E^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{ab} \frac{\langle lm|v|ab \rangle \langle ab|v|lm - ml \rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m}. \quad (3.20)$$



Hasonlóképpen tovább számolhatnánk a harmad-, negyed-, stb. rendű gráfok járulékát, mindig szem előtt tartva, hogy csak azok a gráfok adnak zérustól különböző járulékot, melyek minden egyes kölcsönhatási vonalára külön-külön teljesül az impulzusmegmaradás tétele.

Ez az eljárás azonban nem lenne célravezető, hiszen az így számított perturbációs sor nem konvergál, a magerő végtelen taszító törzse (3. ábra) miatt. Még soft-core magerővel számolva is, az egyes tagok ingadozása — a kölcsönhatás hatványai szerint fejtettünk sorba — igen nagy lenne.

#### IV. Kis sűrűségű maganyag. Bethe—Goldstone-egyenlet

A gráfok megismerésével lényegében eljutottunk arra a pontra, amikor elmondhatjuk, le tudjuk írni a maganyagban (vagy tetszőleges sokrészecskerendszerben) a fizikai folyamatokat. A gráfok járulékait is ki tudjuk számítani (feltéve, hogy a kölcsönhatást ismerjük), tehát a sokrészecskerendszer energiájának számításához szükséges matematikai segédeszközök is rendelkezésünkre állnak.

Látszólag mégis holtpontra jutottunk, hiszen a számunkra érdekes magfizikai problémáknál kezelhetetlennek tűnik a perturbációs sor, a sor megszakítása lehetetlen az erős kölcsönhatás miatt.

Másik lehetőségként kínálkozik, hogy a perturbációs sort a véges tagból álló közelítés helyett olyan végtelen részsorozatával próbáljuk közelíteni, mely

1. konvergens, tehát véges összegű,
  2. ezt az összeget egy kezelhető matematikai eljárással ki tudjuk számítani,
  3. a legfontosabb fizikai folyamatokat leíró gráfok járulékait tartalmazza.
- Ezt a feladatot először a kis sűrűségű maganyag esetére oldjuk meg.

##### *Kis sűrűségű maganyag*

Kis sűrűségű maganyagról akkor beszélünk, ha a nukleonok átlagos távolsága

$$2r_0 \gg R, \quad (4.1)$$

ahol  $R$  a magerő hatótávolsága. Bár az egyensúlyi maganyagban  $r_0 \sim 1,1$  fm, tehát a fenti egyenlőtlenség nem teljesül, remélhető, hogy a kis sűrűségű maganyag tárgyalása jó kiinduló pont lesz, tekinthetjük a maganyag  $\rho \rightarrow 0$  határeseteként.

A (4.1) egyenlőtlenség azt sugallja, hogy a potenciál hatványai szerint haladó sor helyett válasszuk ki a perturbációs sor azon végtelen részsorozatát, melynek sorfejtési paramétere  $(R/r_0)^3 \sim \rho$  (vö.: (2.6)).

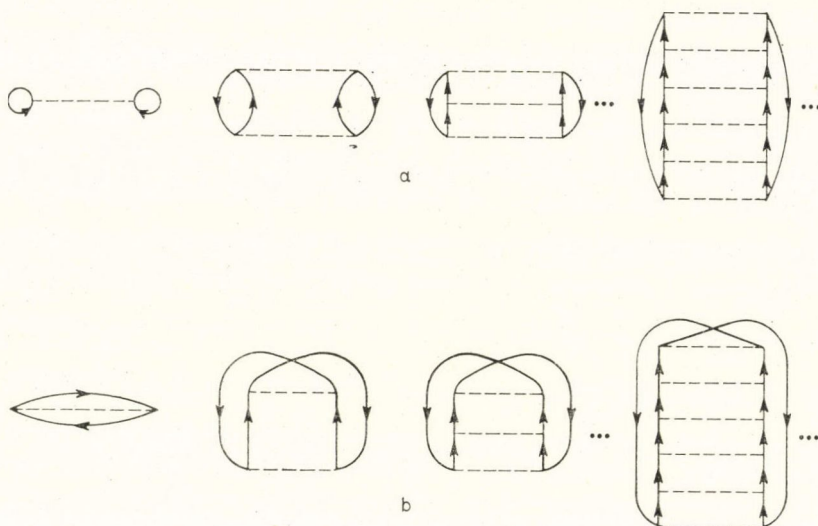
(Bethe egyébként rámutatott arra, hogy a realiztikus maganyagnál sincs okunk aggodalomra, ugyanis a valóságban nem  $(R/r_0)^3$  szerint, hanem  $3(c/r_0)^3$  szerint haladó sort kell figyelembe venni ( $c$  a taszító törzs rádiusza (3. ábra)), ez a paraméter viszont még egyensúlyi maganyagnál is  $\sim 0,14$ .)

Hugenholtz jött rá arra, hogy mely gráfok végtelen sorozatát kell felösszegeznünk ahhoz, hogy a fenti érvelés értelmében a kapott egy nukleonra jutó energia a maganyag sűrűségének lehető legkisebb hatványával legyen arányos, azaz a maganyag energiájának számolásánál a sűrűség hatványai szerinti sorfejtésnek mi lesz az első tagja.



Gondoljuk meg a következőt: ha a maganyag sűrűsége kicsi, akkor a Fermi-impulzus is kicsi (2.6). Egy lyukvonalra való összegzés a Fermi gömbre terjed ki, melynek térfogata arányos  $k_F^3$ -nel, azaz a sűrűséggel. Tehát ki kell választanunk azokat a gráfokat, melyek a lehető legkevesebb lyukvonalat tartalmazzák. Majd akkor, ha nagyobb sűrűségű maganyagot akarunk számolni, következő lépésként az eggyel több lyukvonalat tartalmazó gráfok járulékát is figyelembe vesszük. Szemléletesen: a potenciális energia közelítésénél nem a kevés kölcsönhatási vonalat tartalmazó gráfok járulékait vesszük figyelembe, hanem a kevés lyukvonalat tartalmazó gráfokét.

Minden gráfban legkevesebb két lyukvonal van, feladatunk tehát az, hogy kiválasztva a perturbációs sorból az összes két lyukvonalas gráfot, ezek végtelen sorozatának összegét meghatározzuk.



10. ábra

A 10. ábrán tüntettük fel a kétlyukvonalas gráfokat, melyeket *létragráfoknak* nevezünk. Az *a*) típusúak a direkt, a *b*) típusúak a kicserélődési gráfok. Ezek járulékaiknak összege adja meg a híg maganyag energiáját.

(Megjegyezzük, hogy a létragráfok összege tartalmazza az összes első-, és másodrendű gráfot, csak harmadrendtől felfelé tér el a perturbációs sortól.)

Gondoljuk meg, hogy milyen fizikai folyamat képe az *n*-edrendű létragráf. Az alapállapotú maganyagban két Fermi-gömbön belüli nukleon kölcsönhat. A kölcsönhatás révén kiszoródnak a Fermi-gömbön kívüli állapotba, a Fermi-gömbön belül két lyukállapot marad. A kiszoródott részecskék *n*-szeri kölcsönhatás után (melyek mindegyike újabb Fermi-gömbön kívüli állapotra vezet) végül a lyukállapotokkal kölcsönhatva visszajutnak a Fermi-gömbön belülré, a rendszer ismét alapállapotba kerül.



A gráftechnika szabályait alkalmazva felírható a direkt és kicserélődési gráfok járulékanak összege:

$$\begin{aligned} \text{Direkt} &= \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm|v|lm \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ab} \frac{\langle lm|v|ab \rangle \langle ab|v|lm \rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{abcd} \frac{\langle lm|v|ab \rangle \langle ab|v|cd \rangle \langle cd|v|lm \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)(\varepsilon_c + \varepsilon_d - \varepsilon_l - \varepsilon_m)} + \dots, \\ \text{Kicserélődési} &= - \left[ \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm|v|ml \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ab} \frac{\langle lm|v|ab \rangle \langle ab|v|ml \rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_m - \varepsilon_l} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Vezessük be a  $G(w)$  mátrixot a következő definícióval:

$$\begin{aligned} \langle pq|G(w)|rs \rangle &= \langle pq|v|rs \rangle - \sum_{ab} \frac{\langle pq|v|ab \rangle \langle ab|v|rs \rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - w} + \\ &+ \sum_{abcd} \frac{\langle pq|v|ab \rangle \langle ab|v|cd \rangle \langle cd|v|rs \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - w)(\varepsilon_c + \varepsilon_d - w)} + \dots \end{aligned} \quad (4.3)$$

ahol  $w$  szabad paraméter.

Be fogjuk látni, hogy  $G$  mátrixelemét definiáló sor felösszegezhető, összege véges. Segítségével viszont a létragráfok összege könnyen számolható:

$$\begin{aligned} \text{Direkt} &= \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm|G(\varepsilon_l + \varepsilon_m)|lm \rangle, \\ \text{Kicserélődési} &= - \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm|G(\varepsilon_l + \varepsilon_m)|ml \rangle, \end{aligned} \quad (4.4)$$

tehát a maganyag potenciális energiája, ( $P. E.$ ) kis sűrűség esetén:

$$P. E._{e \rightarrow 0} = \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm|G(\varepsilon_l + \varepsilon_m)|lm - ml \rangle \quad (4.5)$$

Itt ismét szeretnénk felhívni a figyelmet a bevezetőben említett analógiára. Ha  $A$  db pontszerű töltést helyezünk el a térben, a töltött részecskék rendszerének teljes potenciális energiája

$$P. E. = \frac{1}{2} \sum_{l,m=1}^A \frac{1}{\varepsilon} \frac{e_l \cdot e_m}{r_{lm}}$$

alakban írható, azaz az egyes töltések effektív kölcsönhatását összegeztük a teljes részecskeszámra. A (4.5) kifejezésben az összes lyukvonalakra, tehát az alapállapotban betöltött állapotokra, azaz végső soron a részecskék számára összegeztünk, és mindkét esetben az összegzés jele alatt a két részecske effektív kölcsönhatási energiája szerepel.



Végül a (4.3)-ban definiált  $G$  mátrixelemmel kapcsolatban még az alábbi definíciót is bevezetjük:

$$\langle pq|G(w)|rs\rangle = \begin{cases} \text{on the energy shell, ha } w = \varepsilon_p + \varepsilon_q, \text{ vagy } w = \varepsilon_r + \varepsilon_s \\ \text{off the energy shell egyébként.} \end{cases} \quad (4.6)$$

### Bethe—Goldstone-egyenlet

A  $G$ -mátrixot definiáló (4.3) egyenletből azonnal látható, hogy szerkezete a mértani sorhoz hasonló, az összegzés tehát elvégezhető. Mielőtt ezt elvégeznénk, célszerű két újabb kétrészecske operátort bevezetni.

Definiáljuk az ún. *Pauli-operátort*

$$Q|pq\rangle = \begin{cases} |pq\rangle, & \text{ha } |\vec{p}| > k_F \text{ és } |\vec{q}| > k_F \\ 0 \cdot |pq\rangle & \text{egyébként} \end{cases} \quad (4.7)$$

valamint az

$$e|pq\rangle = (\varepsilon_p + \varepsilon_q - w)|pq\rangle \quad (4.8)$$

operátort. Mindkét operátor kétrészecske Hilbert-térben hat. A (4.7) alatt definiált Pauli-operátor bevezetésével a továbbiakban nem kell korlátozódunk a Fermi-gömbön kívüli állapotokra való összegzésre a (4.3) egyenletben.

Az így bevezetett két operátor segítségével a  $G$  operátor definíciós egyenletét mátrixegyenlet helyett operátoregyenletként is megadhatjuk.

$$G(w) = v - v \frac{Q}{e} v + v \frac{Q}{e} v \frac{Q}{e} v + \dots \quad (4.9)$$

Ugyanis a (4.3) egyenletnek pl. a másodrendű tagját a következőképpen alakítjuk:

$$\begin{aligned} \sum_{ab} \frac{\langle pq|v|ab\rangle \langle ab|v|rs\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - w} &= \sum_{ab} \langle pq|v \frac{1}{e} |ab\rangle \langle ab|v|rs\rangle = \\ &= \sum_{tu} \langle pq|v \frac{Q}{e} |tu\rangle \langle tu|v|rs\rangle = \langle pq|v \frac{Q}{e} v|rs\rangle. \end{aligned} \quad (4.10)$$

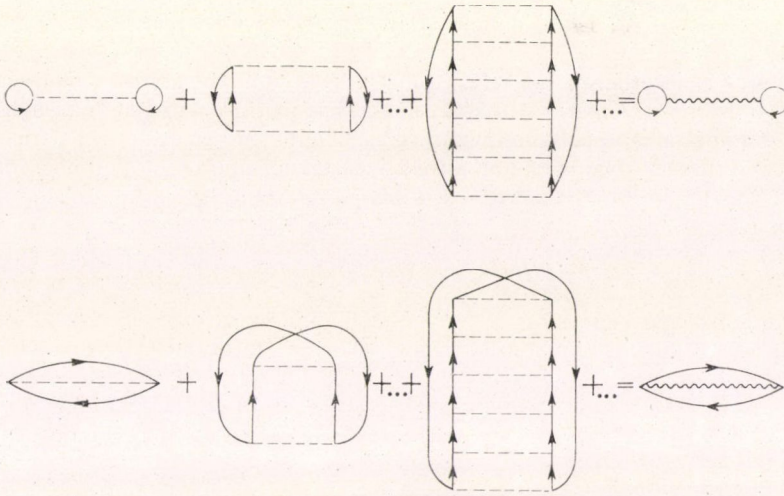
( $Q$  és  $e$  operátorok felcserélhetők, tehát írhatjuk a  $\frac{Q}{e}$  operátorok hányadosát a fenti egyenletben.)

A (4.9) egyenletet átrendezve kapjuk a

$$G(w) = v - v \frac{Q}{e} \left( v - v \frac{Q}{e} v + \dots \right) = v - v \frac{Q}{e} G(w) \quad (4.11)$$

*Bethe—Goldstone-egyenletet*, mely a vákuumbeli kétrészecske kölcsönhatás ismeretében meghatározza a maganyagban kölcsönható nukleonok effektív kétrészecske kölcsönhatási operátorát.  $G$ -t ezen operátoregyenletből meghatározva a híg maganyag potenciális energiája (4.5) alapján számolható.



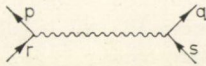


11. ábra

A létragrafok összegére a 11. ábrán látható új jelölést vezetjük be. Definíció szerint a hullámos vonallal jelölt  $G$ -mátrix (effektív kölcsönhatási) vonal egyetlen lyukvonalat sem tartalmaz.

Megjegyezzük, hogy

1. bármely gráfban egy a 12. ábrán látható betétrész redundáns.

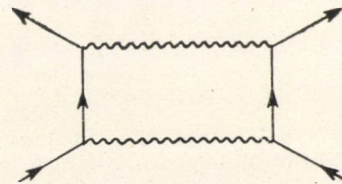
2. A  gráf járuléka is csak akkor különbözik zérustól, ha

$$\vec{p} + \vec{q} = \vec{r} + \vec{s}.$$

A 11. ábrán bevezetett jelöléssel a híg maganyag potenciális energiáját a következőképpen is felírhatjuk:

$$\text{P.E.}_{q \rightarrow o} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \quad (4.12)$$

Szeretnénk felhívni a figyelmet arra, hogy a Bethe—Goldstone-egyenlet rendkívül hasonlít a vákuumbeli kétnukleon szórás leíró Lippman—Schwinger-egyenletre. Lényeges különbség abban jelentkezik, hogy a Bethe—Goldstone-egyenletben fellép a  $Q$  Pauli-operátor, mely biztosítja, hogy a két szóródó nukleon a háttérnukleonok jelenléte miatt csak Fermi-gömbön kívüli állapotba szóródjon (Pauli-elv), míg vákuumban a két szóródó nukleon közbelső állapotai tetszőlegesek lehetnek.



12. ábra

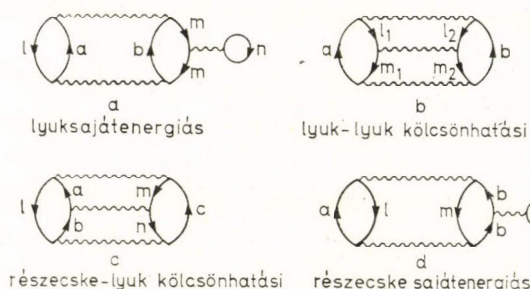


### V. Energiarenormálás, Brueckner-módszer

Az előző fejezetben felösszegeztük a kétlyukvonalas gráfok járulékait, és a Bethe—Goldstone-egyenlet birtokában a híg maganyag energiáját már meg tudjuk határozni. Ennél a lépésnél azonban még nem állhatunk meg, mivel a realisztikus maganyag sűrűsége jóval nagyobb annál az értéknél, melyre a Bethe—Goldstone-egyenlet még jó eredményt ad.

#### Háromlyukvonalas gráfok

Következő lépésként tehát a három lyukvonalat tartalmazó gráfok járulékát számítjuk. A 13. ábrán feltüntettük az összes olyan gráfot, mely három lyukvonalat tartalmaz.



13. ábra

Hangsúlyozzuk, hogy ezen gráfok mindegyike három független lyukvonalat tartalmaz, pl. a lyuk-lyuk kölcsönhatási gráfban a  $G$ -mátrix kölcsönhatási vonalra is érvényes impulzusmegmaradás tétel miatt a négy lyukvonal közül csupán hármat adhatunk meg függetlenül, a negyediket az  $l_1 + \bar{m}_1 = l_2 + \bar{m}_2$  összefüggés már egyértelműen meghatározza.

Jelen előadásban csak a lyuksajátenergiás gráf járulékát fog-

juk kiszámítani (az alább ismertetendő gondolatmenettel teljesen analóg módon határozhatjuk meg a részecskesajátenergiás gráf járulékát).

A lyuk-lyuk kölcsönhatási, valamint a részecske-lyuk kölcsönhatási gráfok tárgyalása azonban már túlmegy ezen előadás keretén, ugyanis ezek a maganyagban fellépő háromtesterők energiájához adnak járulékot. Megjegyezzük, hogy a Fagyjev-módszer birtokában ezen gráfok járuléka is számolható, Bethe kimutatta, hogy mind a részecske-lyuk, ill. lyuk-lyuk kölcsönhatási gráfok, mind pedig a részecske-sajátenergiás gráfok együttes járuléka 1 MeV alatt marad.

Írjuk fel a lyuksajátenergiás gráfok végtelen sorában fellépő első két gráf (14. ábra) járulékának összegét:

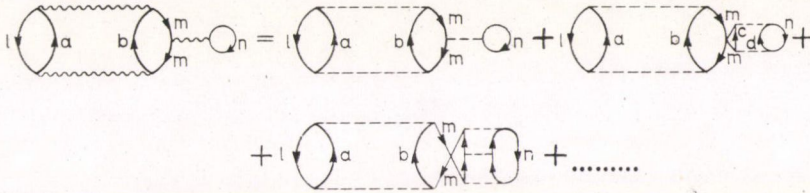
$$\alpha + \beta = - \sum_{ab} \frac{\langle lm | v | ab \rangle \langle ab | v | lm \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^2} \sum_n \left\{ \langle mn | v | mn \rangle - \right. \\ \left. - \sum_{cd} \frac{\langle mn | v | cd \rangle \langle cd | v | mn \rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c + \varepsilon_d - \varepsilon_l - 2\varepsilon_m - \varepsilon_n} \right\} \quad (5.1)$$

Látható, hogy a kapcsos zárójelen belül az  $\langle mn | G(w) | mn \rangle$  mátrixelem sorának első két tagja áll, ez a mátrixelem azonban a (4.6) definíció szerint off shell elem, az energy shift  $= -\varepsilon_a - \varepsilon_b + \varepsilon_m + \varepsilon_l$ , tehát a részecskék kilépése után visszamaradó rendszer az  $l$  és  $n$  nukleonok kölcsönhatása során negatív gerjesztésű állapotba „csúszik”. Ez a tény a lyuksajátenergiás gráfok járulékának számítását meglehetősen

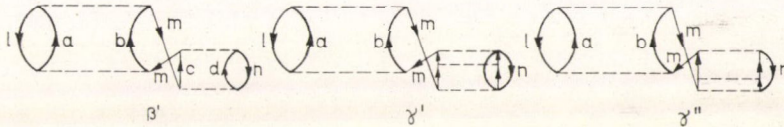


bonyolulttá teszi. *Brueckner* és *Goldman* észrevették, hogy a lyuksajátenergiás gráfok végtelen sorának első három tagjaként nem csupán a 14. ábrán feltüntetett gráfokat kell figyelembe vennünk, hanem a 15. ábrán látható  $\beta'$ ,  $\gamma'$ , ill.  $\gamma''$  gráfok járulékát is tekintetbe kell vennünk. Ezek járuléka csupán az energianevezőben tér el a  $\beta$  ill.  $\gamma$  gráfok járulékától, így az összegezést most már ezekre is kiterjesztve

$$\alpha + \beta + \beta' = - \sum_{ab} \frac{\langle lm | v | ab \rangle \langle ab | v | lm \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^2} \sum_n \left\{ \langle mn | v | mn \rangle - \sum_{cd} \frac{\langle mn | v | cd \rangle \langle cd | v | mn \rangle}{\varepsilon_c + \varepsilon_d - \varepsilon_m - \varepsilon_n} \right\} \quad (5.2)$$



14. ábra

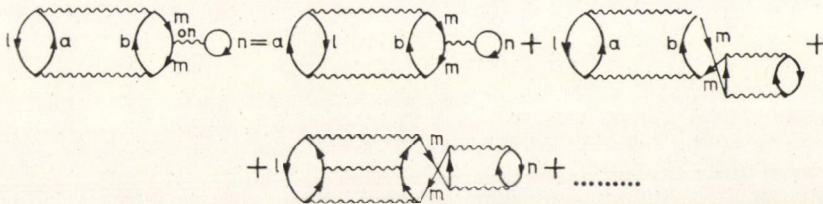


15. ábra

eredményre jutunk, azaz a kapcsos zárójelen belül most már az  $\langle mn | G(w) | mn \rangle$  on shell mátrixelem sorának első két tagja áll. Teljes általánosságban belátható, hogy ha tetszőleges rendű kölcsönhatás esetén minden olyan gráf járulékát tekintetbe vesszük, ahol a gráfok egymástól csupán a kölcsönhatások sorrendjében térnek el, akkor a 16. ábrán látható, lyuksajátenergiás gráf járuléka (most már a kicserélődési gráfok járulékát is figyelembe véve):

$$P. E. \text{ 3 lyukvonal} = \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | G(\varepsilon_l + \varepsilon_m) | lm - ml \rangle - \sum_{ablm} \frac{\langle lm | G(\varepsilon_l + \varepsilon_m) | ab \rangle \langle ab | G(\varepsilon_l + \varepsilon_m) | lm - ml \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^2} \sum_n \langle mn | G(\varepsilon_m + \varepsilon_n) | mn - nm \rangle. \quad (5.3)$$

(5.3)-ban minden mátrixelem on shell elem.



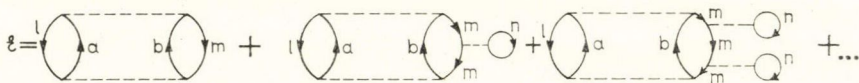
16. ábra



A 16. ábráról leolvashatjuk azt is, hogy a lyuksajátenergiás gráfok annak a fizikai folyamatnak képei, mely során a Fermi-nívón kívülre szóródó részecskék egymással kölcsönhatnak, de ugyanakkor kölcsönhat a rendszerben visszamaradó két lyuk is. Kölcsönhatásuk során újabb részecskék kerülhetnek a Fermi-gömbön kívülre, az egész rendszer állapotában változás áll be, a rendszer polarizálódik. Lényeges különbség van tehát a létragrafokkal leírt fizikai folyamat és a lyuksaját-energiás gráfokkal leírt fizikai folyamat között. A létragrafok csupán azokat a folyamatokat képviselték, melyek során a Fermi-nívón kívülre szóródott részecskék a Pauli-elvet figyelembe véve kölcsönhatottak a Fermi-nívón kívüli állapotokban, de a visszamaradt rendszer állapotának változásairól nem adtak számot.

### Brueckner-módszer

Említettük, hogy a három lyukvonalat tartalmazó gráfok kategóriájában legfontosabbak, mivel legnagyobb járulékot adnak, a lyuksajátenergiás gráfok. Ezek járulékanak számítása nem volt túlságosan nehéz, így eredményünkön felbuzdulva meghatározzuk az egyre több passzív kölcsönhatást tartalmazó gráfok járulékát. Ezen gráfok mindegyike olyan tulajdonságú, hogy adott lyukvonalszám mellett legnagyobb járulékot ad.



17. ábra

Határozzuk meg a 17. ábrán látható gráfok járulékanak összegét:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E} &= -\frac{1}{2} \sum_{ablm} \frac{\langle lm|v|ab\rangle \langle ab|v|lm\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m} - \\
 &\quad -\frac{1}{2} \sum_{ablm} \frac{\langle lm|v|ab\rangle \langle ab|v|lm\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m} \sum_n \frac{\langle ln|v|ln\rangle + \langle mn|v|mn\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m} - \\
 &\quad -\frac{1}{2} \sum_{ablm} \frac{\langle lm|v|ab\rangle \langle ab|v|lm\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m} \sum_n \frac{[\langle ln|v|ln\rangle + \langle mn|v|mn\rangle]^2}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^2} - \dots = \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{ablm} \frac{\langle lm|v|ab\rangle \langle ab|v|lm\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \sum_n \langle ln|v|ln\rangle - \varepsilon_m - \sum_n \langle mn|v|mn\rangle}. \quad (5.4)
 \end{aligned}$$

(5.4) felírásakor kihasználtuk, hogy az egyes tagok az  $l \leftrightarrow m$  összegzőindex cserére szimmetrikusak, valamint észrevettük, hogy a közös tényező kiemelése után geometriai sort kell összegeznünk.

Ha bevezetjük az  $\bar{\varepsilon}_l = \varepsilon_l + \sum_n \langle ln|v|ln\rangle$  jelölést, mondhatjuk, hogy (5.4) energia-nevezőjében már nem az  $l$  ill.  $m$  kvantumszámokkal jellemzett lyukak kinetikus energiája, hanem azoknak a visszamaradt rendszerrel való kölcsönhatás során megváltozott energiája szerepel.



Amennyiben végtelen sok passzív kölcsönhatást az (5.4) gondolatmenet alapján figyelembe veszünk, és a 17. ábra minden kölcsönhatási vonalát nem redundáns módon effektív kölcsönhatási vonalra cserélünk, a potenciális energiára a következő kifejezést kapjuk:

$$P. E._{\text{Brueckner}} = \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | G(E_l + E_m) | lm - ml \rangle, \quad (5.5)$$

ahol

$$E_l = \varepsilon_l + \sum_n \langle ln | G(E_l + E_n) | ln - nl \rangle \quad (5.6)$$

a renormált energia.

Az (5.5) ill. (5.6) egyenletek a *Brueckner-egyenletek*, a módszer, mellyel ezen egyenleteket nyertük, Brueckner-módszer néven ismert. Ezt a módszert itt teljes részletességében nem ismertettük, a Brueckner-egyenleteket nem vezettük le, csak néhány gondolattal érzékeltettük fizikai tartalmukat.

Most megmutatjuk, hogy a híg maganyag energiájára nyert (4.5) kifejezés, valamint a háromlyukvonalas gráfokat is figyelembe vevő (5.3) potenciális energia nem más, mint a Brueckner-egyenletek első, ill. másodrendű közelítése.

Először írjuk fel azt az egyenletet, mely két különböző energiaparaméterhez tartozó  $G$  mátrix között teremt közvetlen kapcsolatot a szabad kétnukleon kölcsönhatás,  $v$  kiküszöbölésével. Legyen  $w_1$  és  $w_2$  a két különböző energiaparaméter. Ekkor

$$G(w_1) = v - G(w_1) \frac{Q}{e(w_1)} v = \left[ 1 - G(w_1) \frac{Q}{e(w_1)} \right] v, \quad (5.7)$$

$$G(w_2) = v - v \frac{Q}{e(w_2)} G(w_2) = v \left[ 1 - \frac{Q}{e(w_2)} G(w_2) \right]. \quad (5.8)$$

Szorozzuk be (5.8)-at balról  $1 - G(w_1) \frac{Q}{e(w_1)}$ -gyel és az így kapott eredményt rendezzük  $G(w_2)$ -re,

$$G(w_2) = G(w_1) + G(w_1) \left[ \frac{Q}{e(w_1)} - \frac{Q}{e(w_2)} \right] G(w_2) \quad (5.9)$$

Ha  $w_1 \sim w_2$ , akkor  $G(w_2)$ -t annak Taylor-sora adja a  $w_1$  hely környezetében:

$$G(w_2) = G(w_1) - (w_2 - w_1) G(w_1) \frac{Q}{e^2(w_1)} G(w_1) + \dots \quad (5.10)$$

azaz mátrixalakban:

$$\begin{aligned} \langle pq | G(w_2) | rs \rangle &= \langle pq | G(w_1) | rs \rangle - \\ &- (w_2 - w_1) \sum_{ab} \frac{\langle pq | G(w_1) | ab \rangle \langle ab | G(w_1) | rs \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - w_1)^2} + \dots \end{aligned} \quad (5.11)$$

Ha  $w_1 = \varepsilon_l + \varepsilon_m$  és  $w_2 = E_l + E_m$ , ahol  $\varepsilon_l$  és  $\varepsilon_m$  az  $l$  ill.  $m$  kvantumszámú lyukak



kinetikus energiája,  $E_l$  és  $E_m$  pedig az (5.6) egyenlettel renormált energiák, akkor (5.5)-öt (5.11) alapján a következőképpen írhatjuk:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | G(E_l + E_m) | lm - ml \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | G(\varepsilon_l + \varepsilon_m) | lm - ml \rangle - \\ - \frac{1}{2} \sum_{lm} \frac{\langle lm | G(\varepsilon_l + \varepsilon_m) | ab \rangle \langle ab | G(\varepsilon_l + \varepsilon_m) | lm - ml \rangle}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_l - \varepsilon_m)^2} &\sum_n \{ \langle ln | G(\varepsilon_l + \varepsilon_n) | ln - nl \rangle + \\ + \langle mn | G(\varepsilon_m + \varepsilon_n) | mn - nm \rangle \} &+ \dots \end{aligned} \quad (5.12)$$

Vegyük észre, hogy (5.3) az (5.12) sorfejtés első két tagjával egyezik meg. Ugyancsak (5.12)-ből látszik, hogy

$$\begin{aligned} \text{P.E.} &= \text{Brueckner} + \text{exchange} + o(G^4) \\ &= \text{Brueckner} + \text{exchange} + o(G^4) \end{aligned}$$

azaz a Brueckner-egyenletek első közelítését valóban a (4.5) egyenlet, második közelítését pedig az (5.3) egyenlet adja meg.

Ha felidézzük a IV. fejezet bevezetőjében elmondottakat, láthatjuk, hogy a Brueckner-egyenletek felírásával lényegében eljutottunk arra a pontra, ahol elmondhatjuk, a maganyagban ható kétnukleon kölcsönhatás problémájának fizikai kérdéseit sikerült megoldani. Ezen állításunkat az teszi jogossá, hogy a Brueckner-egyenletek tartalmazzák az akár végtelen sok passzív kölcsönhatással „felöltöztetett” létragrafokat is, tehát a Brueckner-egyenletek végtelen sok lyukvonalat tartalmazó gráfok járulékaikról is számot adnak. Még egyszer hangsúlyozzuk, hogy a Brueckner-egyenletek felírásával nem vettük figyelembe az összes lehetséges gráfot, mely a maganyagban az  $E$  energia perturbációs sorfejtéséhez járulékot ad, de kétségtelen, hogy a kétnukleon probléma legfontosabb fizikai folyamatairól számot adó gráfokat összegezve jutottunk a Brueckner-egyenletekhez.

Nyílt kérdés még, hogy bár a kiválasztott gráfok sora konvergens, tudjuk-e ennek összegét kezelhető matematikai eljárással számítani, hiszen még a Bethe—Goldstone-egyenlet megoldásának birtokában is implicit egyenletünk van  $E$ -re (l. (5.6)).

A továbbiakban a maganyagbeli kétnukleon probléma matematikai megoldásáról lesz szó.

## VI. Bethe—Goldstone-egyenlet megoldása

Az előző két fejezetben láttuk, hogy a  $G$  mátrix alapvetően fontos szerepet játszik a maganyag elméletében. Ahhoz, hogy a maganyag energiáját bármelyik közelítésben — akár kis, akár realisztikus magsűrűség esetén — meg tudjuk határozni, ismernünk kell a  $G$  mátrix tulajdonságait, ki kell tudnunk számítani mátrix-elemeit.

A Bethe—Goldstone-egyenlet felírásakor láttuk, hogy a  $G$  operátor kétrészecske Hilbert-térben hat. Tehát, ha a  $G(w)|p_1 p_2\rangle$  mennyiséget bármely  $|p_1 p_2\rangle$  állapotra ismerjük, akkor ismerjük magát a  $G(w)$  operátort is. (Itt  $|p_1 p_2\rangle$  a szabad nukleonok  $|p_1\rangle, |p_2\rangle$  állapotából felépített kétrészecske állapotot jelöli.)



Definiáljuk a  $|\Psi_{p_1 p_2}\rangle$  korrelált kétrészecske vektort a következő egyenlettel:

$$v|\Psi_{p_1 p_2}\rangle = G|p_1 p_2\rangle \quad (6.1)$$

ahol  $v$  a szabad kétnukleon kölcsönhatás. A (6.1) egyenlet lehetővé teszi, hogy a feltevezésünk szerint ismert, szabad kétnukleon kölcsönhatás mátrixelemeit határozzuk meg a maganyagban fellépő korrelált kétrészecske vektorokkal, és ezek megadják az ismeretlen effektív kétnukleon kölcsönhatás mátrixelemeit. Természetesen ebben a megfogalmazásban a  $G$  operátor helyett az ismeretlen  $|\Psi_{p_1 p_2}\rangle$  vektort kell meghatározni.

Szorozzuk be a (4.11) Bethe—Goldstone-egyenletet jobbról  $|p_1 p_2\rangle$  vektorral, és használjuk fel a (6.1) definíciós egyenletet. Ekkor  $|\Psi_{p_1 p_2}\rangle$ -re a következő egyenletet kapjuk:

$$|\Psi_{p_1 p_2}\rangle = |p_1 p_2\rangle - \frac{Q}{e} v |\Psi_{p_1 p_2}\rangle, \quad (6.2)$$

majd az  $1 = \sum_{q_1 q_2} |q_1 q_2\rangle \langle q_1 q_2|$  egységoperátor segítségével az egyenlet második tagját tovább alakítva  $|\Psi_{p_1 p_2}\rangle$ -re a

$$|\Psi_{p_1 p_2}\rangle = |p_1 p_2\rangle - \sum_{q_1 q_2} \frac{Q_{q_1 q_2}}{\varepsilon_{q_1} + \varepsilon_{q_2} - W} |q_1 q_2\rangle \langle q_1 q_2| v |\Psi_{p_1 p_2}\rangle \quad (6.3)$$

összefüggést kapjuk, ahol  $Q_{q_1 q_2}$  a  $Q$  operátor sajátértéke a  $|q_1 q_2\rangle$  vektorral.

Mielőtt még továbbmennénk, célszerű impulzusreprezentációról koordináta reprezentációra áttérni. A kétnukleon potenciálban fellépő erős taszítást általában végtelen taszító törzzsel írjuk le, ekkor viszont megkívánjuk, hogy a korrelált hullámfüggvény a taszítótörzsen belül zérus legyen. Ezt a feltételt koordinátareprezentációban egyszerűbben le tudjuk írni, mint impulzusreprezentációban. A (6.3) egyenlet koordinátareprezentációban:

$$\Psi_{p_1 p_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\Omega} e^{i(\vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2)} - \frac{1}{\Omega^2} \sum_{q_1 q_2} \frac{Q_{q_1 q_2}}{\varepsilon_{q_1} + \varepsilon_{q_2} - W} e^{i(\vec{q}_1 \vec{r}_1 + \vec{q}_2 \vec{r}_2)} \int e^{-i(\vec{q}_1 \vec{r}'_1 + \vec{q}_2 \vec{r}'_2)} \cdot v(\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2) \Psi_{p_1 p_2}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) d\vec{r}'_1 d\vec{r}'_2. \quad (6.4)$$

Mivel a vákuumbeli kétnukleon potenciál translációinvariáns, áttérünk tömegközépponti és relatív koordinátákra az

$$\begin{aligned} \bar{R} &= \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \bar{P} &= \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad \bar{p} = \frac{1}{2} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \end{aligned} \quad (6.5)$$

egyenletekkel, melyek következményeként írhatjuk, hogy

$$\bar{p}_1 \vec{r}_1 + \bar{p}_2 \vec{r}_2 = \bar{P} \bar{R} + \bar{p} \vec{r}. \quad (6.6)$$



Mivel a perturbálatlan egyrészecske függvények síkhullámok, a belőlük alkotott  $|p_1 p_2\rangle$  függvények a tömegközépponti koordinátáktól triviálisan függenek,

$$|p_1 p_2\rangle = \frac{1}{\Omega} e^{i\vec{P}\vec{R}} e^{i\vec{p}\vec{r}}.$$

$Q$  valamint az  $e$  operátorok sem képesek ( $v$ -hez hasonlóan) a kétnukleon állapot összipulzusát megváltoztatni, ezért feltesszük, hogy

$$\Psi_{p_1 p_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\Omega} e^{i\vec{P}\vec{R}} \psi_{\vec{P}}^p(\vec{r}) \quad (6.7)$$

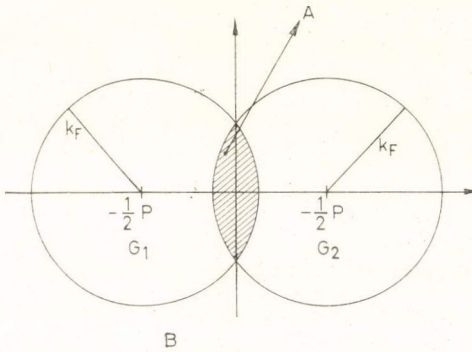
alakban írható, ahol a  $\psi_{\vec{P}}^p(\vec{r})$  függvény csupán a relatív helyvektor függvénye és tartalmazza az összes információt a kétrészecske korrelációról.

Ezzel a (6.4) egyenlet helyett a következőt írhatjuk:

$$\psi_{\vec{P}}^p(\vec{r}) = e^{i\vec{P}\vec{r}} - \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{q}} \frac{Q(\vec{P}, \vec{q})}{P^2 \frac{q^2}{4M} + M - w} e^{i\vec{q}\vec{r}} \int e^{-i\vec{q}\vec{r}'} v(\vec{r}') \psi_{\vec{P}}^p(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (6.8)$$

Itt  $\vec{P} = \vec{q}_1 + \vec{q}_2$ ,  $\vec{q} = \vec{q}_1 - \vec{q}_2$  és összegeznünk kell  $\vec{q}$ -ra. Ha  $Q$ -nak (4.7) alatt felírt definíciójában az egyes részecskék impulzusát a tömegközépponti és relatív impulzusokkal kifejezve írjuk,  $Q(\vec{P}, \vec{q})$  mennyiség értékéről a következőt állíthatjuk:

$$Q(\vec{P}, \vec{q}) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \left| \frac{1}{2} \vec{P} + \vec{q} \right| \leq k_F \text{ és } \left| \frac{1}{2} \vec{P} - \vec{q} \right| \leq k_F \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases} \quad (6.9)$$



18. ábra

azaz, ha az impulzustérben a vízszintes tengelyen a  $-\frac{1}{2}P$  ill.  $\frac{1}{2}P$  pont körüli  $k_F$  sugarú gömböket  $G_1$  ill.  $G_2$ -vel jelöljük (l. 18. ábra), továbbá  $A$ -val jelöljük az impulzustér azon részét, melyet mindkét gömb tartalmaz és a két gömb együttesének komplementerét  $B$ -vel jelöljük, mondhatjuk, hogy  $Q(\vec{P}, \vec{q})$  csak akkor vesz fel zérustól különböző értéket, ha a  $q_1, q_2$  állapotok relatív impulzusának végpontja a  $B$  tartományba esik.

Térjünk át  $q$  szerinti összegzés helyett  $q$  szerinti integrálásra a (6.8) egyenletben.

Bevezetve az

$$K^p(\vec{r} - \vec{r}') = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{Q(\vec{P}, \vec{q})}{P^2 \frac{q^2}{4M} + M - w} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (6.10)$$

Green-függvényt, a  $\psi_{\vec{P}}^p(\vec{r})$  kétrészecske hullámfüggvényre a következő lineáris integrálegyenletet kapjuk:

$$\psi_{\vec{P}}^p(\vec{r}) = e^{i\vec{P}\vec{r}} - \int K^p(\vec{r} - \vec{r}') v(\vec{r}') \psi_{\vec{P}}^p(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (6.11)$$



Azonnal láthatjuk, hogy (6.11) a vákuumbeli kétnukleon szórási probléma Lippman—Schwinger-egyenletének analogonja, egyedüli különbség, hogy itt a Green-függvényben fellép a  $Q$  Pauli-operátor. Bár a  $Q$  operátor fellépése komplikáltabbá teszi a (6.11) egyenlet megoldását, hiszen értéke függ  $\bar{P}$ ,  $\bar{q}$  abszolút értékétől és az általuk bezárt szögtől, mégis mondhatjuk, hogy (6.11) megoldása a rendelkezésünkre álló számítógéppark mellett nem okoz nehézséget.

### Healing

A (6.11) egyenletből látható, hogy  $|\bar{r}| \rightarrow \infty$ -nél  $\Psi_{\bar{p}}^P(\bar{r}) \sim e^{i\bar{p}\bar{r}}$ . Konkrét számításonkánál kiderül, hogy  $\psi$  nagy  $r$ -ekre oly gyorsan eléri a perturbálatlan síkhullámot, hogy szórásról nem is beszélhetünk. Ezt a jelenséget nevezzük a kétnukleon hullámfüggvény healing-jének.

Híg maganyagnál a  $w$  energiaparaméter a  $\bar{p}_1$ ,  $\bar{p}_2$  impulzusú részecskék kinetikus energiájának összegével egyezik meg, ahol  $|\bar{p}_1| \leq k_F$ ,  $|\bar{p}_2| \leq k_F$ . A  $\bar{p}$  relatív impulzus szükségképpen a 18. ábra  $A$  tartományába esik.  $\psi_{\bar{p}}^P$ -nek (6.8) alatti Fourier-komponensekkel kifejezett alakjában az energianevező ekkor a következőképpen alakul:

$$\frac{P^2}{4M} + \frac{q^2}{M} - w = \frac{q^2}{M} - \frac{p^2}{M},$$

ahol  $\bar{q} \in B$ ,  $\bar{p} \in A$ , tehát  $|\bar{q}| > |\bar{p}|$ .

A (6.8) Fourier-sorfejtésben a  $Q(\bar{P}, \bar{q})$  Pauli-operátor fellépte miatt  $\psi_{\bar{p}}^P$ -nek csak azok a Fourier-komponensei lesznek zérustól különbözők (magát a perturbálatlan relatív impulzusú síkhullámot kivéve), melyek a Fermi-tenger felett kölcsönható nukleonok relatív impulzusával jellemezhetők. Látható tehát, hogy  $\psi_{\bar{p}}^P$ -nek nincs olyan Fourier-komponense, melynek energiája megegyezik a kezdeti energiával, ugyanakkor relatív impulzusa különbözik a kezdeti  $\bar{p}$  relatív impulzustól. Így valódi szórásról nem is beszélhetünk, a  $\psi_{\bar{p}}^P(\bar{r}) - \exp(i\bar{p}\bar{r})$  különbség  $1/r$ -nél gyorsabban tart zérushoz.

A híg maganyag kétnukleon hullámfüggvényének sorfejtésében fellépő  $Q$  Pauli-operátor okozta healinget *Pauli healing*nek nevezzük.

Most megmutatjuk, hogy a self-consistent számolással nyert kétnukleon hullámfüggvény is mutat healinget még abban az esetben is, ha  $Q=1$ , azaz ha a Pauli-elvet figyelmen kívül hagyjuk.

Tudjuk, hogy a Brueckner-egyenletekben az energiaparaméter  $w = E_{\bar{p}_1} + E_{\bar{p}_2}$ , melyről kimutatjuk, hogy mindig negatív. Ezt a következőképpen láthatjuk be:

$$E_{\bar{p}} = \frac{p^2}{2M} + \sum_{\bar{q} < k_F} \langle \bar{p}\bar{q} | G | \bar{p}\bar{q} - \bar{q}\bar{p} \rangle \quad (6.12)$$

a potenciális energia pedig

$$P. E. = \frac{1}{2} \sum_{\bar{p}, \bar{q} < k_F} \langle \bar{p}\bar{q} | G | \bar{p}\bar{q} - \bar{q}\bar{p} \rangle. \quad (6.13)$$

Ha az összes, Fermi-gömbön belüli  $\bar{p}$  impulzushoz tartozó renormált energiát összeadjuk (figyelembe véve a spin és izospin miatti négyszeres betöltést), eredményünk a következő lesz:

$$4 \sum_{\bar{p} < k_F} E_{\bar{p}} = K. E. + 2P. E. \quad (6.14)$$



Innen P. E.-t kifejezve és behelyettesítve az összenergia

$$E = K. E. + P. E. = 4 \sum_{\bar{p} < k_F} \frac{1}{2} \left( \frac{p^2}{2M} + E_{\bar{p}} \right) \quad (6.15)$$

kifejezésébe, az energiát a kinetikus és renormált energiák segítségével ki tudjuk fejezni.

Az egyensúlyi maganyag energiája mindig negatív, míg a (6.15) jobb oldalának első tagja (a kinetikus energia) mindig pozitív. Ebből szükségképpen következik a renormált energia, tehát a  $w$  energiaparaméter negatív volta.

Ezt figyelembe véve és  $Q=1$ -et a (6.10) Green-függvénybe helyettesítve az integrálás analitikusan elvégezhető,

$$K_{\bar{p}}(\bar{r} - \bar{r}') = M \int \frac{d\bar{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2 + \left( \frac{1}{4} P^2 - M w \right)} e^{i\bar{q}(\bar{r} - \bar{r}')} = - \frac{M}{4\pi} \frac{e^{-\gamma|\bar{r} - \bar{r}'|}}{|\bar{r} - \bar{r}'|}, \quad (6.16)$$

ahol bevezettük a  $\gamma^2 = \frac{1}{4} P^2 - M w$  jelölést.

Láthatjuk, hogy  $\psi_{\bar{p}}^P(\bar{r})$  csak akkor különbözik az  $\exp(i\bar{p}\bar{r})$  síkhullámtól, ha a relatív helyvektor abszolút értéke kisebb, mint a magerók hatósugara  $+1/\gamma$ . Mivel ez a típusú healing akkor is fellép, ha  $Q=1$  és csupán a lyuksajátenergiák figyelembevétele (negatív  $w$  fellépte) okozza, *renormalizációs healing*nek nevezzük.

## VII. A Brueckner-egyenletek megoldása iterációs eljárással

A Brueckner egyenletek fizikai tartalmát az V. fejezetben részletesen megbeszéltük, a jelen fejezetben a Brueckner-egyenletek megoldásának technikáját ismertetjük. A tulajdonképpeni nehézséget az  $E_m$  renormált energiák kiszámítása jelenti, melyhez meg kell oldanunk az (5.6) implicit egyenletet. A legcélszerűbben úgy járhatunk el, ha a renormált energiákat egy iterációs eljárással határozzuk meg. Kiindulásként felvesszünk egy ésszerűen választott  $E_m^0$  energiát, ahol természetesen  $|\bar{m}| < k_F$ , mert csak a Fermi-tengeren belüli állapotok érdekelnek bennünket. Ezen kiinduló renormált energiák segítségével képezzük a  $w = E_m^0 + E_l^0$  energiaparamétert, majd megoldjuk a Bethe—Goldstone-egyenletet a VI. fejezetben ismertetett módszerrel. Az ily módon meghatározott  $G$  operátor mátrixelemeit (5.6)-ba helyettesítve kapjuk a renormált energiák  $E_m^1$ , első közelítését. Az iteráció következő lépésében ezen első közelítéssel képezzük a  $w$  energiaparamétert, majd a Bethe—Goldstone-egyenlet megoldása után (5.6)-ból már az  $E_m^2$  második közelítést kapjuk. Az eljárást addig folytatjuk, míg self-consistenssé nem válik, azaz amíg a kiinduló  $E_m^j$  és a végeredményül kapott  $E_m^{j+1}$  energiák eltérése egy előre megadott  $\delta$  hibakorlát alá nem süllyed.

Magától értetődik, hogy az eljárás numerikus keresztülvitelekor a renormált energiákat csak véges sok  $\bar{m}$  impulzusra számíthatjuk ki, melyeket rendre

$$\bar{m}_0, \bar{m}_1, \dots, \bar{m}_r, \dots, \bar{m}_N \quad (7.1)$$

-el jelölünk. Ezen  $N$  darab impulzusértéknek természetesen elegendő sűrűn kell elhelyezkedni a Fermi-gömbben, úgyhogy a Fermi-gömbre vonatkozó integrálokat



a (7.1) alappontok felhasználásával valamilyen numerikus integrációs módszerrel kiszámíthatjuk.

Összefoglalásként felsoroljuk a számítás fontosabb lépéseit.

1. Kiválasztunk egy  $r, s$  számpárt, ahol  $0 \leq r, s \leq N$ .

2. (6.5) mintájára meghatározzuk az  $\bar{m}_r$  és  $\bar{m}_s$  impulzusokhoz tartozó  $\bar{P}$  összimpulzust és a  $\bar{p}$  relatív impulzust, továbbá képezzük a renormált energiák kiinduló értékei segítségével a  $w = E_{\bar{m}_r}^0 + E_{\bar{m}_s}^0$  energiaparamétert.

3. Kiszámítjuk a (6.10) formulával definiált Green-függvényt.

4. A Green-függvény ismeretében megoldjuk a kétrészecske hullámfüggvényre vonatkozó (6.11) egyenletet.

5. A hullámfüggvény birtokában képezhetjük a  $G$  effektív kölcsönhatás részünkre fontos mátrixelemeit. (6.1) és (6.7) kombinálásával kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\langle \bar{m}_r \bar{m}_s | G | \bar{m}_r \bar{m}_s \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int e^{-i\bar{p}\bar{r}} v(\bar{r}) \psi(\bar{r}) d\bar{r} \\ \langle \bar{m}_r \bar{m}_s | G | \bar{m}_s \bar{m}_r \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int e^{+i\bar{p}\bar{r}} v(\bar{r}) \psi(\bar{r}) d\bar{r}.\end{aligned}\quad (7.2)$$

A mátrixelemek, mint látjuk fordítva arányosak  $\Omega$ -val. Ha (7.2) két egyenletét kivonjuk egymásból és bevezetjük a  $\tilde{G} = \Omega G$  jelölést, úgy kapjuk, hogy

$$\langle \bar{m}_r \bar{m}_s | \tilde{G} | \bar{m}_r \bar{m}_s - \bar{m}_s \bar{m}_r \rangle = -2i \int \sin(\bar{p}\bar{r}) v(\bar{r}) \psi(\bar{r}) d\bar{r}. \quad (7.3)$$

6. Az iterációs eljárás következő lépésének megfelelő renormált energiát (5.6) mintájára számítjuk ki. Ha  $\bar{m}_s$  szerinti összegezésről áttérünk  $\bar{m}_s$  szerinti integrálásra és  $G$ -ről  $\tilde{G}$ -ra, akkor írhatjuk, hogy

$$E_{\bar{m}_r} = \frac{\bar{m}_r^2}{2M} + \int \frac{d\bar{m}_s}{(2\pi)^3} \langle \bar{m}_r \bar{m}_s | \tilde{G} | \bar{m}_r \bar{m}_s - \bar{m}_s \bar{m}_r \rangle. \quad (7.4)$$

7. Most a (7.4)-gyel kapott renormált energiát tekintjük kiinduló  $E_{\bar{m}_r}^0$ -nak és az eljárást megismételjük mindaddig, míg a self-consistenciát kifejező

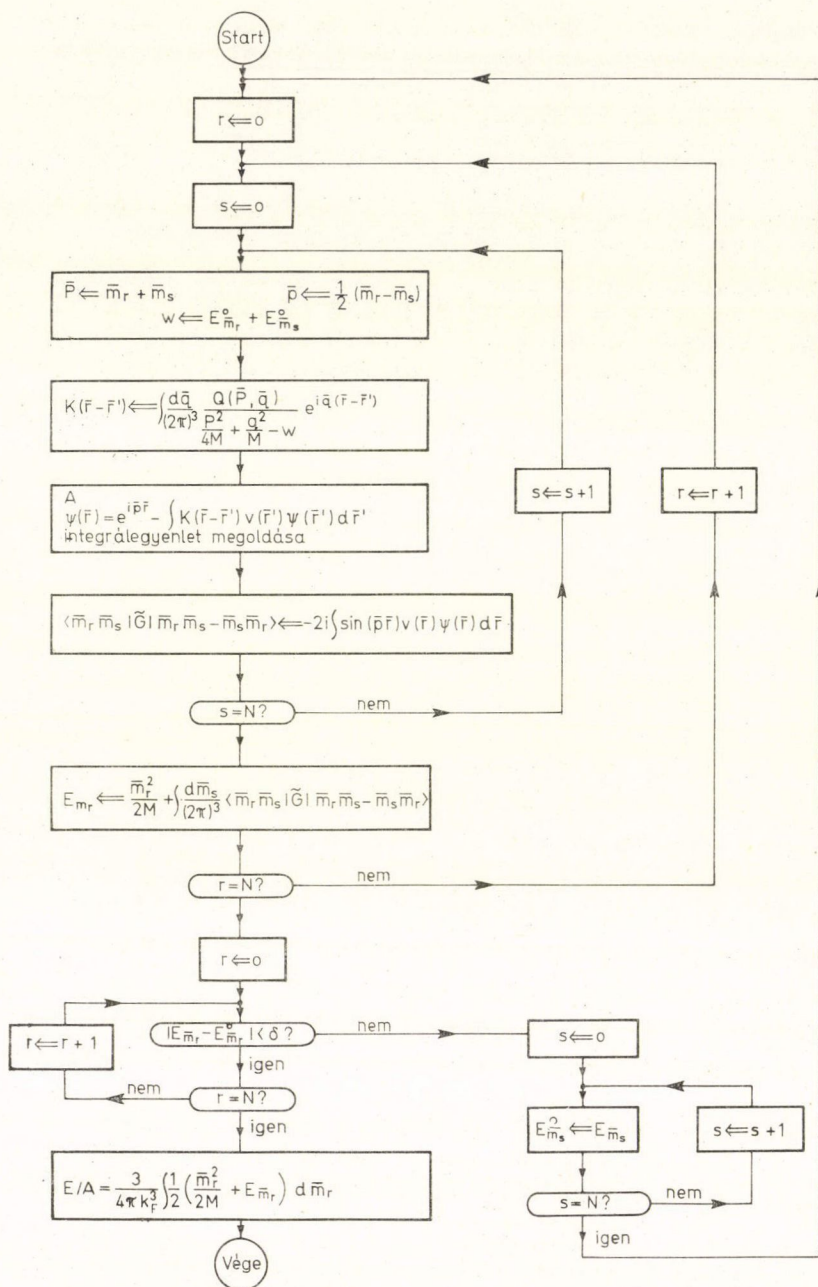
$$|E_{\bar{m}_r} - E_{\bar{m}_r}^0| < \delta \quad (7.5)$$

feltétel nem teljesül. A self-consistens renormált energiák birtokában a maganyag energiáját (6.15) segítségével számítjuk ki. Az egy nukleonra eső energia kifejezését úgy kapjuk meg, ha (6.15)-öt elosztjuk az  $A$  nukleonszám és a  $k_F$  Fermi-impulzus között fennálló (2.4) összefüggéssel.

$$E/A = \frac{3}{4\pi k_F^3} \int \frac{1}{2} \left( \frac{\bar{m}_r^2}{2M} + E_{\bar{m}_r} \right) d\bar{m}_r. \quad (7.6)$$

A számítás menetét a 19. áb.-án látható blokkdiagram szemlélteti.





19. ábra



Végül ismertetjük a számítások eredményeit. A vákuumbeli magerők potenciáljára az irodalomban több realiztikusnak nevezhető potenciálforma van, mi a Moskowsky és Scott által javasolt standard hard core (SHC) kölcsönhatást tekintjük.

$$v(r) = +\infty, \quad \text{ha } r \leq a$$

$$v(r) = -V_0 e^{-\mu(r-a)} \cdot \frac{1}{2} (1 + P_r), \quad \text{ha } r > a$$

ahol:  $a = 0,4 \text{ fm}$  — a taszító gömb sugara

$\mu = 2,083 \text{ fm}^{-1}$  — a magerők hatótávának reciproka

$V_0 = 260 \text{ MeV}$  — a csatolás erőssége

$P_r$  = Két nukleon helykoordinátáját felcserélő Majorana-operátor.

E potenciálformulában spinfüggés nincs figyelembe véve, ez a nehéz magoknál a kiátlagolás miatt indokolt.

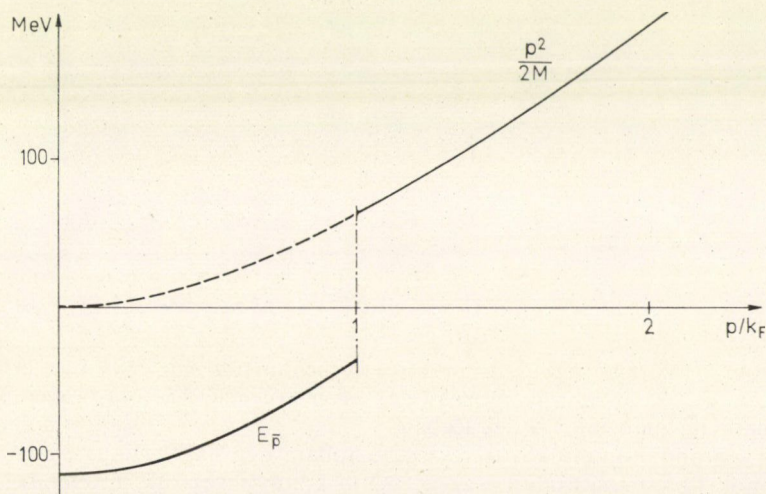
Az SHC magerő esetén a Brueckner-egyenletekből számított  $E/A$  érték, mint a  $\rho$  nukleonsűrűség függvénye az 1. ábrának megfelelő lefutást mutat. A minimumhoz tartozó stabilis állapot adatai

$$E/A = -15,2 \text{ MeV}$$

$$r_0 = 1,02 \text{ fm}, \quad \rho = 0,23 \text{ fm}^{-3}, \quad k_F = 1,5 \text{ fm}^{-1}$$

Ezek az értékek igen jól egyeznek az I. fejezetben ismertetett empirikus adatokkal. A maganyag problémáját tehát a vákuumra érvényes SHC-ből kiindulva kitűnően oldotta meg a Brueckner-módszer.

Megjegyezzük, hogy e számítások megmutatták, hogy az energia-renormálásnak milyen fontos szerepe van. Ha a maganyag energiáját a híg nukleongázra levezetett Bethe—Goldstone-egyenletből számítjuk ki, úgy az egyensúlyi sűrűsége  $r_0 = 0,98 \text{ fm}$ , az egy nukleonra eső energiára pedig  $E/A = -34 \text{ MeV}$  adódik. Ez utóbbi adat



20. ábra



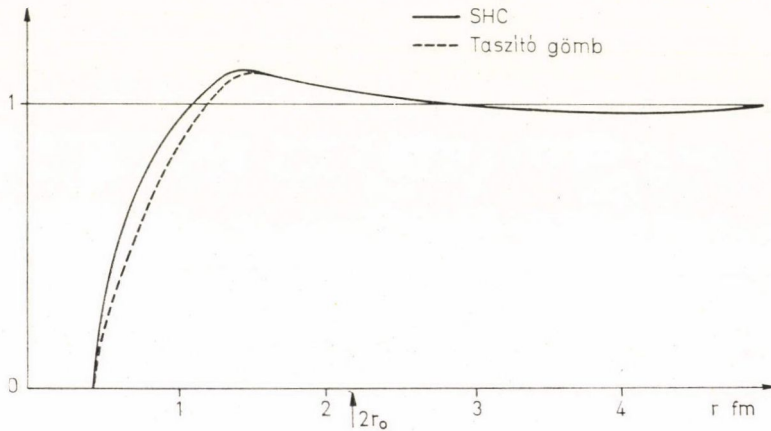
durván eltér az empirikus értéktől és ez felhívja a figyelmet arra, hogy a lyuksaját-energiás gráfok járuléka mennyire fontos.

Az alábbiakban még néhány részleteredményt mutatunk be. A 20. ábrán az  $E_{\bar{p}}$  renormált energiát szemléltetjük, mint a  $p$  impulzus függvényét. Mivel  $p > k_F$  esetén nincs renormálás, ezért itt  $E_{\bar{p}} = \varepsilon_p = \frac{p^2}{2M}$ . A  $p < k_F$  lyukállapotokra kapott  $E_{\bar{p}}$  görbe igen jól approximálható egy parabolával

$$E_{\bar{p}} = \frac{p^2}{2M^*} - A, \quad (7.7)$$

ahol  $A = -112$  MeV és  $M^* = 0,73 M$ .  $M^*$ -ot a maganyagbeli nukleonok effektív tömegének nevezzük.

A  $\psi(\bar{r})$  kétrészecske-hullámfüggvény healing-tulajdonságát illusztrálja a 21. ábra, melyen a  $\psi(\bar{r})$   $s$ -hullám komponensének és az  $e^{i\bar{p}\bar{r}}$  síkhullám  $s$ -komponensének viszonyát ábrázoltuk mint  $r$  függvényét. Az ábra a  $p = 0,128$  fm relatív impulzus esetére vonatkozik, tehát két olyan nukleonra, melyek a Fermi-tenger alján helyezkednek el. Az ábráról látható, hogy  $a \sim 2r_0$  átlagos nukleontávolságnál a kétrészecske hullámfüggvény már alig különbözik a kölcsönhatásmentes mozgást leíró síkhullámtól. Az a tény, hogy a healing már  $2r_0$ -nál bekövetkezik, rávilágít arra, hogy a magok független részecske héjmodellje miért alkalmazható olyan sikerrel.



21. ábra

Viszont 1 fm távolság alatt a kétrészecske hullámfüggvény már erősen eltér a síkhullámtól. A nukleonok mozgásának ezen korrelációja fontos szerepet játszik a nagyenergiájú magreakciók leírásában.

A 21. ábrán feltüntettük a kétrészecske hullámfüggvényt arra az esetre is, amikor a nukleonok kölcsönhatásából csak a taszító gömböt vesszük figyelembe. Az SHC potenciállal és a tiszta taszító gömbbel számított hullámfüggvények alig térnek el



egymástól. A potenciál vonzó részének hatása tehát elég gyenge és ezért sokszor csak perturbációnak tekintjük.

A maganyagban mozgó nukleonok effektív kölcsönhatásának jellemzésére *Brandow* egy  $g(\vec{r})$  lokális effektív potenciált vezetett be a következő definícióval

$$g(\vec{r})e^{i\vec{p}\vec{r}} = v(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (7.8)$$

A  $\psi$  hullámfüggvény ismeretében a  $g(\vec{r})$  lokális potenciál minden nehézség nélkül meghatározható. Az eredményt (1.5) alatt már felírtuk, illetve a 3. ábrán illusztráltuk.

#### IRODALOM

1. *B. D. Day*, Rev. Mod. Phys. 39, 719, 1967.
2. *J. Dabrowski*, Fundamentals and Elementary Outline of the Many-Body Theory of Nuclear Matter, International Course on Nuclear Theory, Miramare, Trieste, Italy, 1969.







# KÉT SZABAD NUKLEON KÖLCSÖNHATÁSA\*

M. J. MORAVCSIK

Institute of Theoretical Science and Department of Physics,  
University of Oregon, Eugene, Oregon, USA

és

International Centre of Theoretical Physics, Miramare, Trieste, Olaszország

## TARTALOMJEGYZÉK

### Bevezetés

- I. Az  $M$ -mátrix szerkezete
- II. Parciális hullámok
- III. Potenciálok
- IV. Mezonelmélet
- V. A jelenlegi helyzet összefoglalása

### Bevezetés

Ezen előadások célja, hogy a magfizikusoknak rövid áttekintést adjunk arról, jelenleg mennyire ismerjük a két szabad nukleon kölcsönhatását. Nem törekszünk teljességre már csak azért sem, mivel a Nyári Iskolán ugyanezen témáról másik előadássorozat is elhangzott.

Az előadás általános gondolatmenete a következő: kiindulunk a kétnukleon kölcsönhatás olyan leírásából, amely csupán igen általános megfontolásokon, tehát szilárd alapokon nyugszik, és olyan leírásokhoz jutunk végül, amelyek speciális dinamikai feltevéseken alapulnak, ezért vitathatók és kevésbé megalapozottak. Az utóbbi típusú leírások azonban különböző feltevések folytán sokkal gazdaságosabbak és a reakció mechanizmusába mélyebb bepillantást engednek.

### I. Az $M$ -mátrix szerkezete

A kétnukleon kölcsönhatás olyan legáltalánosabb leírásához, amely az általános megmaradási tételeket veszi figyelembe, az  $M$ -mátrix segítségével juthatunk.

Általánosságban tekintsük a következő reakciót: [1]:

$$A + B \rightarrow C + D \quad (1.1)$$

ahol  $A, B, C$  és  $D$  tetszőleges spinű részecskéket jelöl. Jelölje ezen reakció  $M$ -mátrixát  $M_1$ , míg az

$$A + O \rightarrow C + O \quad (1.2)$$

valamint a

$$O + B \rightarrow O + D \quad (1.3)$$

reakciók mátrixát  $M_2$ -vel ill.  $M_3$ -mal jelöljük. Az (1.2) ill. (1.3) egyenletekben  $O$ -val zérus spinű részecskéket jelöltünk. Ezek után írhatjuk, hogy

$$M_1(=) M_2 \otimes M_3 \quad (1.4)$$

\* Az előadás a VI. Magyar Magfizikai Nyári Iskolán (Tihany, 1969) hangzott el.



ahol az egyenlőség a jobb- és baloldal azon tulajdonságaira vonatkozik, amelyek a dinamikát nem érintik. Így tehát elegendő az (1.2) ill. (1.3) típusú reakciók  $M$ -mátrixának struktúráját vizsgálni, mivel az (1.1) típusú reakciók struktúrája belőlük levezethető.

Tekintsük pl. az (1.2)  $M$ -mátrixát. Ez a következőképpen írható:

$$M = \sum_{J=|s_A-s_C|}^{s_A+s_C} \sum_r a_J^r S_{[J]}(s_C, s_A) : T_{[J]}^r, \quad (1.5)$$

ahol  $s_A$  és  $s_C$  jelölik az  $A$  és  $C$  részecskék spinjét,  $S_{[J]}(s_C, s_A)$   $J$ -edrangú spintenzor,  $T_{[J]}^r$  pedig  $J$ -edrangú impulzustenzor (mivel több  $J$ -edrangú impulzustenzor van, egymástól az  $r$  felső index különbözteti meg őket)  $a_J^r$  pedig invariáns amplitúdó.  $A$ : jelölés a tenzorindexek teljes kontrakcióját jelöli. Az (1.5) kifejezés felírásakor egyetlen feltevéssel éltünk, feltettük, hogy  $M$  forgásinvariáns, azaz  $M$  zérusrangú tenzor. Kimutatható továbbá, hogy (1.5)-ben  $x \equiv (2s_A + 1)(2s_C + 1)$  számú tag van, mivel pontosan ennyi eleme van annak a mátrixnak, mely összekapcsolja a kezdeti  $2s_A + 1$  spinállapotot a végső  $2s_C + 1$  spinállapottal.

A kísérletileg mérhető mennyiségek az

$$L[S_{[J_I]}(s_A, s_A) : T_{[J_I]}^{r_I}, S_{[J_F]}(s_B, s_B) : T_{[J_F]}^{r_F}]$$

függvények, melyek következőképpen fejezhetők ki az  $M$ -mátrix elemeinek segítségével:

$$L[S_{[J_I]}(s_A, s_A) : T_{[J_I]}^{r_I}, S_{[J_F]}(s_B, s_B) : T_{[J_F]}^{r_F}] = \text{Tr}(MS_{[J_I]} : T_{[J_I]}^{r_I} M^+ S_{[J_F]} : T_{[J_F]}^{r_F}) \quad (1.6)$$

ahol  $+$  jelenti az operátor hermitikus konjugáltját és az egyenlet jobb oldalán a rövidség kedvéért a spintenzorok argumentumát elhagytuk. (1.5)-öt (1.6)-ba helyettesítve az

$$L[S_{[J_I]} : T_{[J_I]}^{r_I}, S_{[J_F]} : T_{[J_F]}^{r_F}] = \sum_{J_1, r_1} \sum_{J_2, r_2} a_{J_1}^{r_1} a_{J_2}^{r_2*} X_{J_1 J_I J_2 J_F}^{r_1 r_I r_2 r_F} \quad (1.7)$$

kifejezésre jutunk, ahol bevezettük az

$$X_{J_1 J_I J_2 J_F}^{r_1 r_I r_2 r_F} \equiv \text{Tr}\{S_{[J_1]} : T_{[J_1]}^{r_1} S_{[J_I]} : T_{[J_I]}^{r_I} (S_{[J_2]} : T_{[J_2]}^{r_2})^+ S_{[J_F]} : T_{[J_F]}^{r_F}\} \quad (1.8)$$

jelölést.

Az  $M$  mátrix (1.5) alatt felírt kifejezésében az összes dinamikai információt az  $a_J^r$  amplitúdók numerikus értéke tartalmazza, így tehát az  $S_J : T_J^r$  tenzorszorzat a dinamikától csaknem teljesen függetlenül leírható, csupán a reakció kinematikáját jellemző  $s_A$  és  $s_C$  értéket, valamint az impulzusok értékét kell ismernünk. Így tehát az  $X_{J_1 J_I J_2 J_F}^{r_1 r_I r_2 r_F}$  mennyiségek teljesen függetlenek a dinamikától, különböző spinértékekhez tartozó numerikus értékük egyszer s mindenkorra táblázatban összefoglalhatók. Az (1.7) kifejezés tartalma tehát a következő: a kísérletileg mérhető mennyiségek, azaz az  $L(S : T, S : T)$  függvények invariáns amplitúdók bilineáris szorzatainak összegeként írhatók fel, ahol az együtthatók a dinamikától függetlenek.

Mint láttuk, az  $a_J^r$  amplitúdók száma az (1.5) kifejezésben  $x$ , így az (1.7)-ben fellépő  $a_{J_1}^{r_1} a_{J_2}^{r_2*}$  szorzatok száma  $x^2$ . Az összes  $L(S_{[J]}(s_A, s_A) T_{[J_I]}^{r_I} S : T)$  függvények száma pedig

$$\left( \sum_0^{2s_A} (2s+1) \right) \left( \sum_0^{2s_C} (2s+1) \right) = (2s_A + 1)^2 (2s_C + 1)^2 = x^2,$$



így a mi esetünkben, amikor az  $M$ -mátrixról csupán forgásinvarianciát tételezünk fel, az  $L$  függvények száma éppen az  $aa^*$  szorzatok számával egyezik meg, azaz  $L$ -ek egymástól *lineárisan* függetlenek.

Az  $L$  függvényeket és az  $aa^*$  szorzatokat az  $X$  mennyiségek kapcsolják össze, melyek száma  $x^4$ , tehát ha az invariáns amplitúdók tulajdonságait kísérletileg szeretnénk tanulmányozni, ismernünk kell  $X$   $x^2 \cdot x^2$ -szeres mátrixának tulajdonságait.

Általában  $x^4$  még kis  $x$  esetén is nagy szám, így várható, hogy az  $L$ -ek és  $aa^*$ -ok közti kapcsolat eléggé áttekinthetetlen. Néhány ötlettel azonban ez a bonyolult kapcsolat jelentősen egyszerűsíthető. Az eddigiekben még nem határoztuk meg az impulzusokat, melyek a  $T'_{[J]}$  tenzort alkotják. Ezen tenzor négyrészeske reakció esetén általában két vektorból és egy pszeudovektorból áll. Használhatjuk pl. a kezdeti és végállapothoz tartozó tömegközépponti impulzusokat,  $\vec{q}$ ,  $\vec{q}'$ -t, valamint ezek vektorszorzatát  $\vec{q} \times \vec{q}'$ -t. Előnyösebb azonban a következő ortonormált rendszert használni:

$$\hat{l} \equiv \frac{\vec{q}' - \vec{q}}{|\vec{q}' - \vec{q}|}, \quad \hat{m} \equiv \frac{\vec{q}' \times \vec{q}}{|\vec{q}' \times \vec{q}|}, \quad \hat{n} = \hat{l} \times \hat{m}. \quad (1.9)$$

Ezek szintén egyszerű transzformációs tulajdonságokkal rendelkeznek, ha fennállnak bizonyos szimmetriák, melyeket a továbbiakban feltételezünk. De ha csupán forgásinvarianciát tételezünk is fel, (1.9) alatt felírt mennyiségek akkor is nagyon hasznosnak bizonyulnak. Kimutatható ugyanis, hogy ha a  $T'_{[J]}$  impulzusvektort  $\hat{l}$ ,  $\hat{m}$  és  $\hat{n}$  alkotja,  $X$  elemei legtöbbje zérus lesz. Nevezetesen, az (1.2) reakcióhoz tartozó  $L$  függvények nyolc egységre, ún. szorzategységekre oszthatók oly módon, hogy egy adott alosztálybeli kísérletileg mérhető mennyiség nem az összes  $aa^*$  szorzattól fog függeni, hanem csupán az egyik szorzategység  $aa^*$ -ainak valós, egy másik szorzategység  $aa^*$ -ainak pedig képzetes részétől. Még részletesebben, jelöljük az alosztályokat aszerint, hogy az  $L$ -ek argumentumában az  $\hat{l}$ ,  $\hat{m}$ ,  $\hat{n}$ -ek száma rendre páros, ( $e$ ) vagy páratlan ( $o$ ). Így a nyolc alosztály ( $eee$ ), ( $eeo$ ), ( $oeo$ ), ( $ooo$ ), ( $eeo$ ), ( $oeo$ ), ( $ooo$ ) és ( $ooo$ ) jelölésű. Hasonlóan a szorzategységeket is jelölhetjük aszerint, hogy a velük kapcsolatos  $S: T$  tenzorszorzatban fellépő  $\hat{l}$ ,  $\hat{m}$ ,  $\hat{n}$  mennyiségek száma páros-e vagy páratlan. Így a nyolc szorzategységnek a nyolc alosztállyal azonos típusú megjelölése van. Ezek után a következő szabályt mondhatjuk ki: egy adott alosztály annak a szorzategységnek valós részétől fog függeni, melynek vele azonos a jelölése, és a konjugált, azaz az  $e \leftrightarrow o$  cserével előállított jelölésű szorzategység képzetes részétől függ. Így pl. az ( $oeo$ ) alosztály az ( $oeo$ ) szorzategység valós, és az ( $ooo$ ) szorzategység képzetes részétől függ.

Látjuk tehát, hogy az impulzusvektorok alkalmas rendszerét választva az  $X$ -ek  $x^2 \cdot x^2$ -es mátrixát kvázidiagonális alakra hozhatjuk, azaz 8 kisebb mátrixot helyezhetünk el az eredeti mátrix diagonális mentén. Ezek a kis mátrixok közel egyenlő nagyságúak, következésképpen az  $x^4$  számból kb. ezek  $1/8$ -a különbözik zérustól.

Azonban nem állíthatjuk, hogy a fenti parciális diagonalizálás optimális, esetleg a bázis impulzusok jobb választásával még jobb diagonalizálást is elérhetünk.

Ha (1.1) típusú reakcióról van szó, melyet az (1.2) ill. (1.3) reakciók szorzataként előállíthatunk, az egyszerűsítés még nagyobb, ugyanis (1.1)-et 32 alosztályra és 32 szorzategységre bonthatjuk, így ebben az esetben csupán  $1/32$   $x^4$  zérustól különböző elem van.

Az  $M$  mátrix (1.5) alatt megadott  $x$  tagú alakja akkor érvényes, ha csupán forgási invarianciát tételezünk fel. Amennyiben további szimmetriákat is felteszünk,



az  $M$ -mátrix alakjára további megkötéseket kapunk. Pl. ha paritásmegmaradás is érvényes, és a négy részecske belső paritásának szorzata pozitív, az  $M$  mátrix szükségképpen skalár mennyiség lesz, nem pedig pszeudoskalár. Ebből következik, hogy a jobboldal összes tagja skalár kell legyen. Továbbá négyrészecske reakciók esetén az  $a$  amplitúdók mindig skalár mennyiségek, azaz zérusrangú tenzorfüggvények, melyeket a reakciót jellemző impulzusokból, azaz  $\vec{q}$ ,  $\vec{q}'$ ,  $\vec{q} \times \vec{q}'$ -okból alkotunk. Így azoknak a tagoknak, melyekben az  $S:T$  tenzorszorzat pszeudoskalár, el kell tűnniök, azaz a hozzájuk tartozó  $a$  amplitúdók azonosan zérusok. Részletesen megvizsgálva kiderül, hogy (1.5) tagjainak kb. a fele ebbe a kategóriába esik, így a paritásmegmaradás feltételezésével az  $a$  amplitúdók számát körülbelül a felére csökkentettük. Ezek szerint az  $aa^*$  szorzatok száma kb.  $x^2/4$ , ugyanakkor a különböző  $L$ -ek száma továbbra is  $x^2$ , mivel nyilvánvalóan a spinállapotok mérésére szolgáló kísérleti elrendezések száma független attól, hogy a paritás megmarad-e vagy sem. Így ebben az esetben  $L$ -ek között kb.  $3x^2/4$  lineáris összefüggés lesz, mely összefüggések a paritásmegmaradás, valamint a belső parítások kísérleti ellenőrzésének teljes rendszerét adják. Hasonlóan lehet megadni a töltésinvarianciára, a  $PT$ -invarianciára és az időtükrözésre vonatkozó kísérleti ellenőrzés teljes felsorolását [2].

Most már alkalmazhatjuk a fent vázolt leírást két nukleon szórására [3]. A reakció

$$1/2 + 1/2 \rightarrow 1/2 + 1/2 \quad (1.10)$$

típusú, melyet az

$$1/2 + 0 \rightarrow 1/2 + 0 \quad (1.11)$$

valamint

$$0 + 1/2 \rightarrow 0 + 1/2 \quad (1.12)$$

reakciók szorzataként írhatunk fel. Az (1.11) valamint az (1.12) reakciók azonosak, és formailag megegyeznek a pion-nukleon szórás reakcióegyenletével is. A rotációinvariáns  $M$  mátrix alakja a következő:

$$M = a_0 + a_1 \vec{\sigma} \vec{l} + a_2 \vec{\sigma} \vec{m} + a_3 \vec{\sigma} \vec{n}. \quad (1.13)$$

Az (1.11) reakció esetén az  $L$  függvények száma 16, kapcsolatuk az  $aa^*$  szorzatokkal az irodalomból [4] ismert. Forgásinvarianciát feltételezve a  $16^2 = 256$   $X$  elem helyett csupán 40 különbözik zérustól. Ha feltesszük, hogy a reakció során a paritás megmarad és időinvariancia is van, akkor  $a_1 = a_3 = 0$ . Így az amplitúdóknak csupán 4 bilineáris kombinációja lép fel, tehát a 16  $L$  között 12 lineáris kapcsolatot írhatunk fel. Közülük nyolcat a paritásmegmaradás ellenőrzésének tekinthetünk, további négy pedig a négy részecske belső paritásának szorzatát határozza meg kísérletileg.

Az (1.4) összefüggést felhasználva az (1.10) reakció  $M$ -mátrixát felírhatjuk a következőképpen:

$$\begin{aligned} M = & A_{00} + A_{01} \sigma^{(1)} \hat{l} + A_{02} \sigma^{(1)} \hat{m} + A_{03} \sigma^{(1)} \hat{n} + \\ & + A_{10} \sigma^{(2)} \hat{l} + A_{11} \sigma^{(1)} \hat{l} \sigma^{(2)} \hat{l} + A_{12} \sigma^{(1)} \hat{n} \sigma^{(2)} \hat{l} + A_{13} \sigma^{(1)} \hat{n} \sigma^{(2)} \hat{l} + \\ & + A_{20} \sigma^{(2)} \hat{m} + A_{21} \sigma^{(1)} \hat{l} \sigma^{(2)} \hat{m} + A_{22} \sigma^{(1)} \hat{m} \sigma^{(2)} \hat{m} + A_{23} \sigma^{(1)} \hat{n} \sigma^{(2)} \hat{m} + \\ & + A_{30} \sigma^{(2)} \hat{n} + A_{31} \sigma^{(1)} \hat{l} \sigma^{(2)} \hat{n} + A_{32} \sigma^{(1)} \hat{m} \sigma^{(2)} \hat{n} + A_{33} \sigma^{(1)} \hat{n} \sigma^{(2)} \hat{n}. \end{aligned} \quad (1.14)$$



Az így felírt kifejezés 16 tagból áll, következésképpen  $256 AA^*$  szorzatunk és  $256 L$  függvényünk van. Az  $AA^*$ -okat  $L$ -ekkel összekapcsoló  $256 \cdot 256$ -os mátrix általában tehát  $256^2 = 65\,536$  elemből áll. Mivel az impulzus bázisvektorokat (1.9) alatt felírt módon választottuk, csupán 2240 elem fog zérustól különbözni. Az irodalomban [3] megtalálható ezen reakció kísérletileg megfigyelhető mennyiségeinek részletes tárgyalása.

Ha feltesszük, hogy a reakció során a paritás megmarad, (1.14) egyszerűbb alakú lesz, mivel  $A_{12} = A_{21} = A_{32} = A_{23} = 0$ . Ha ezzel szemben időtükrözési invarianciát tételezünk fel, az  $A_{01} = A_{10} = A_{12} = A_{21} = A_{13} = A_{31} = 0$  megkötést kapjuk. Így, ha a két megmaradási tételt egyidejűleg alkalmazzuk, (1.14)-ben csupán  $6A$  különbözik zérustól, nevezetesen:  $A_{00}$ ,  $A_{02}$ ,  $A_{11}$ ,  $A_{20}$ ,  $A_{22}$  és  $A_{33}$ . Könnyű a paritásmegmaradás és az időtükrözési invariancia megkötéseit alkalmazni az  $M$  mátrixra. Ha időtükrözési invarianciát tételezünk fel, minden olyan tagnak el kell tűnnie, melyekben  $l$ -ek száma páratlan, míg paritásmegmaradás esetén azon tagok tűnnek el, melyekben  $l$ -ek és  $m$ -ek száma együttesen páratlan.

Amennyiben azonos nukleonok szórását tárgyaljuk [5] ( $p$ - $p$  szórás, vagy töltésfüggetlen  $N$ - $N$  szórás), akkor meg kell követelnünk, hogy kifejezésünk az (1) ↔ (2) indexcserével szemben invariáns legyen, azaz  $A_{ij} = A_{ji}$   $i, j = 0, 1, 2, 3$ . Ha a paritás-megmaradást és az időtükrözési invarianciát továbbra is feltesszük, az azonos nukleonok csupán egyetlen további egyszerűsítést jelentenek, nevezetesen  $A_{02} = A_{20}$ , tehát csupán 5 zérustól különböző amplitúdónk lesz.

Amennyiben az amplitúdók száma 6 vagy 5, szorzataik száma ( $AA^*$ ) 36 vagy 25, így  $L$ -ek között 220, vagy 231 lineáris összefüggés lesz, melyeket az első esetben a paritás megmaradás és az időtükrözési invariancia ellenőrzésének tekinthetünk, míg a második esetben ezeken kívül még a részecskék azonosságát is ellenőrizni tudjuk. Az egyre bonyolultabb polarizációs kísérletek gyorsan fejlődő technikája, valamint a megújuló érdeklődés az erős kölcsönhatás megmaradási tételei iránt minden bizonnyal azt eredményezik, hogy a nukleon-nukleon szórás kísérletileg megfigyelhető mennyiségei közti, fenti összefüggések közül néhány nagy érdeklődésre tarthat majd számot.

Jelen Nyári Iskola hallgatóságát közvetlenül az a probléma érdekli, hogyan lehet valójában e fenti amplitúdókat kísérletekből meghatározni, hiszen az Iskola célja az, hogy a szabad nukleon-nukleon kölcsönhatást megismerve azt megszerkezeti számításokban alkalmazza. Még teljesen általános válasz nincs arra a kérdésre, hogy tetszőleges spinű részecskék reakcióját tanulmányozva milyen kísérletek határozzák meg egyértelműen az amplitúdókat, de részleteredmények már vannak [6]. Teljesen nyilvánvaló, hogy ha  $n$  darab amplitúdót szeretnénk meghatározni, úgy legalább  $2n - 1$  kísérletre van szükségünk, mivel az amplitúdók komplex mennyiségek, egy tetszőleges (szabadon hagyott) fázissal. Az szintén teljesen világos, hogy nem lehet *tetszőlegesen* kiválasztani  $2n - 1$  kísérletet ahhoz, hogy célt érjünk.

Nukleon-nukleon szórás esetén 11 ill. 9 kísérletet lehet találni, melyek az amplitúdókat meghatározzák. Ezeket a kísérleteket minden olyan szögnél és energiánál el kell végeznünk, ahol az amplitúdók értékére kíváncsiak vagyunk.

Későbbiekben látni fogjuk, hogy olyan energiáknál, ahol jelenleg a nukleon-nukleon szórási amplitúdók ismertek, nem a fenti módszerrel határozták meg az amplitúdókat, hanem parciális hullámok módszerével. Alacsony energiáknál, ahol a parciális hullámokból csupán néhány dominál és a rugalmatlan csatornák még nem játszanak jelentős szerepet, valóban könnyebb parciális hullámokkal számolni,



mint a fenti módszert alkalmazni. Magasabb energiáknál azonban, ahol sok parciális hullámot kell figyelembe venni és a rugalmatlan csatornák is lényegesek, de még nem olyan magasak az energiák, hogy eltekinthetnénk ezektől az adatoktól a megszerkezeti számolásokról, elképzelhető, hogy az amplitúdók egyértelmű meghatározása érdekében véghez kell vinnünk adott energiánál és adott szögnél mind a 9, ill. 11 különböző típusú kísérletet.

#### IRODALOM (I. fejezet)

- [1] *P. L. Csonka, M. J. Moravcsik and M. D. Scadron*, Phys. Lett. 15, 353, 1965 és 20, 67, 1966; Phys. Rev. Lett. 14, 861, 1965; Annals of Phys. 40, 100, 1966 és 41, 1, 1967; Phys. Rev. 143, 775, 1966; 143, 1324, 1966; 152, 1310, 1966; 165, 1915, 1968; 167, 1516, 1968; és Nuovo Cimento 42, 743, 1966; 50, 422, 1967; Rev. Mod. Phys. 39, 178, 1967 Journ. of Nat. Sci. and Math. 6, 1, 1966, *M. J. Moravcsik*, Phys. Rev. 170, 1440, 1968; *Gordon and Breach*: Recent Developments in Particle Physics, 1966. pp. 187—263; Proceedings of the International Conference on Polarization Phenomena of Nucleons, Birkhäuser Verlag, 1965. p. 159; Proceedings of Williamsburg conference on Intermediate Energy Physics, 1966, p. 517; Lectures on Non-Dynamical Tests of Conservation Laws in Particle Reactions, Williamsburg, 1966 (kiadatlan); Non-Dynamical Properties of Particle Reactions, beküldött előadás a XIV. International Conference on High Energy Physics, Bécs 1968 konferencián (kiadatlan). Lásd még: *G. Kane and M. Moravcsik*, Phys. Rev. 176, 1733, 1968.
- [2] *P. L. Csonka and M. J. Moravcsik*, Phys. Rev. 152, 1310, 1966; 165, 1915, 1968 and 167, 1516, 1968.
- [3] Részletesebben lásd: *M. J. Moravcsik*, Proceedings of the International Conference on Polarization Phenomena of Nucleons, Birkhäuser Verlag, 1965 p. 159.
- [4] *P. L. Csonka, M. J. Moravcsik and M. D. Scardon*, Rev. Mod. Phys. 39, 178, 1967.
- [5] A részecskék azonosságából eredő megszorítások általános tárgyalását lásd: *P. L. Csonka és M. J. Moravcsik*, Non-Dynamical Structure of Particle Reactions with Identical Particles (megjelenőben).
- [6] *M. J. Moravcsik*, Phys. Rev. 170, 1440, 1968; *M. J. Moravcsik and Y. W. Yu*, Journ. Math. Phys. 10, 925, 1969; *M. Simonius*, Phys. Rev. Lett. 19, 279, 1967; *M. Simonius*, magánközlemény, valamint megjelenőben.

#### II. Parciális hullámok

Amikor parciális hullámok szerint fejtünk sorba, kihasználjuk azt, hogy nemcsak a rotációinvariancia és egyéb invarianciatételek érvényesek, de érvényes a teljes impulzusmomentum megmaradásának tétele. Természetesen az összipulzusmomentum megmaradása következik a rotációinvarianciából, de míg az I. fejezetben feltettük a rotációinvarianciát, a  $J$  megmaradását közvetlenül nem használtuk ki, ugyanis az egyes amplitúdókat adott szögnél és energiánál vizsgáltuk.  $J$  megmaradását akkor használjuk ki, ha olyan kísérleti adatokat használunk, melyek egy adott energiára, de ugyanakkor az összes szögre vonatkoznak.

A parciális hullámokra bontás módszerének alapjai jól ismertek. Zérus spinű négy részecske reakciók esetén a szórási amplitúdó a következőképpen írható

$$f(E, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(E) P_l(\theta) (2l+1), \quad (2.1)$$

ahol  $E$  az energia,  $\theta$  a szórási szög,  $P_l(\theta)$  pedig Legendre-polinom. Zérus spinű részecskék esetén  $l$  azonos  $J$ -vel, a teljes impulzusmomentummal.



Adott  $l$  és  $E$  esetén  $f_l(E)$  komplex szám. Azonban, ha olyan esetet tekintünk, ahol a rugalmatlan csatornák zártak, a teljes valószínűségmegmaradás (azaz az unitaritás)  $f_l(E)$ -re igen egyszerű megkötést ad. Ebben az esetben ugyanis

$$f_l(E) = \frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l(E)} - 1), \quad (2.2)$$

ahol  $\delta_l(E)$  valós mennyiség. Így az unitaritás lehetővé teszi, hogy a komplex  $f_l(E)$  mennyiséget egyetlen valós mennyiséggel fejezzük ki.

Ha rugalmatlan csatornák is nyitva vannak, a valószínűségmegmaradás egymaga majdnem semmi megkötést nem ad a rugalmas szórási amplitúdóra. Ekkor a következő kifejezéshez jutunk:

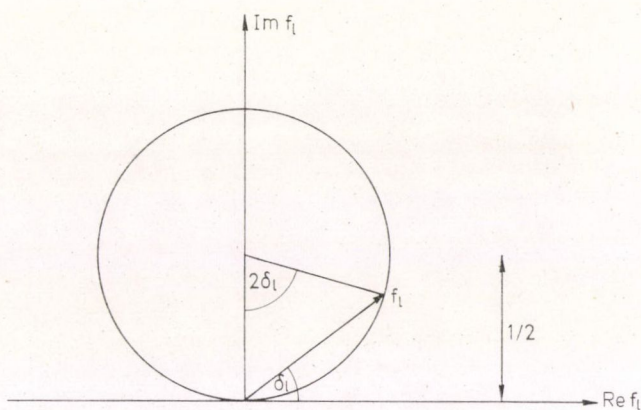
$$f_l(E) = \frac{1}{2i}(\eta_l(E)e^{2i\delta_l(E)} - 1), \quad (2.3)$$

ahol  $\eta_l(E)$  az abszorpciós paraméter, melyre  $0 < \eta < 1$ . Az 1. és 2. ábrán láthatjuk az itt elmondottakat, nevezetesen

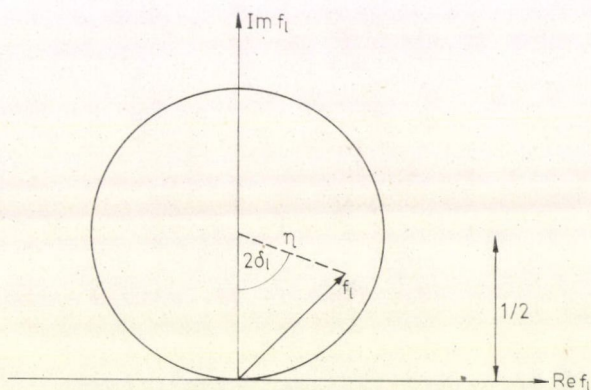
teljesen rugalmas esetben az amplitúdó kötelezően az „unitaritási kör”-ön fekszik, míg nyitott rugalmatlan csatornák esetén az amplitúdó valahol az „unitaritási kör” belsejében fekszik.

Ha a reakcióban spinnel rendelkező részecskék vesznek részt, akkor — mint azt az I. fejezetben láttuk — több amplitúdó van. Parciális hullámokra bontásuk lényegében a (2.1)-ben felírt módon történik, részleteiben azonban abban különbözik, hogy egy adott  $J$ -hez most már több tag tartozik, mivel  $J$  és  $l$  már nem egyeznek meg [1]. Ennek megfelelően a szögtől függő függvények már nem egyszerű Legendre-polinomok lesznek, hanem Legendre-függvények. A nukleon-nukleon szórás ilyen sorfejtése az irodalomban [2] adott.

A (2.1) sorfejtés végtelen sok tagból áll,  $P_l$ -ek végtelen sokasága alkot teljes rendszert. Ha a gyakorlatban valóban ezt a végtelen sort szeretnénk felhasználni, a (2.1) kifejezés nem vezetne semmi eredményre. Egy nagyon fontos kísérleti tény azonban kiutat mutat. Kihaszználjuk, hogy az erős kölcsönható erők, így a két nukleon erők véges hatótávolságúak. Ezzel azt akarjuk kifejezésre juttatni, hogy az erő növekvő távolsággal elég gyorsan csökken, egy bizonyos távolságon túl elha-



1. ábra



2. ábra



nyagolhatóan tekinthetjük, bár elvben az erő nem válik zérussá még igen nagy távolságoknál sem. Ugyanakkor a Coulomb erőnek nincs ilyen véges hatótávolsága, lényeges, még ha kicsi is, nagy távolságoknál is.

Az erős kölcsönható erők és a Coulomb erő közötti fenti különbség a két nukleon problémában sokat egyszerűsít, mivel első közelítésben feltehetjük, hogy proton szórásnál nagy távolságokban csak Coulomb kölcsönhatás van, míg rövid távolságok esetén dominál az erős kölcsönhatás, és kicsi az a távolságtartomány, ahol a két kölcsönhatás kb. összemérhető nagyságrendű. Mivel a kísérletek a teljes proton-proton kölcsönhatás fáziseltolását adják meg, minket viszont csak ennek erősen kölcsönható része érdekel, megkíséreljük a kettőt egymástól elválasztani. Ezt nagyon megkönnyíti az a tény, hogy a két kölcsönhatás effektív hatótávolsága élesen különbözik. A teljes szórási mátrixot a következő alakban írhatjuk [3]:

$$S - 1 = (S - S_c) + (S_c - 1), \quad (2.4)$$

ahol  $S_c$  a Coulomb-szórási-mátrix. A következő feltevessel élhetünk:

- $S - S_c$  csak kis távolságoknál különbözik zérustól,
- $S_c - 1$  a Coulomb-szórási-mátrix, és így zárt alakban írható.

Ha ezen kívül még az ún. „bar” fázisokat használjuk, a *fázisok* jó közelítéssel additívak lesznek és így az erős kölcsönhatásra jellemző fázis a teljes fázisból megkapható, amennyiben az utóbbiból a Coulomb-fázist kivonjuk.

Világítsuk meg néhány szóval az éppen említett „bar” fázisokat [4]. Még ebben a fejezetben korábban említettük, hogy a spinek fellépése a (2.1) sorfejtést komplikálttá teszi. Attól eltekintve, hogy a fejezet elején említett változás a formula szögtől függő részében bekövetkezik, még további bonyodalmat okoz az, hogy az  $S$  mátrix az impulzusmomentum térben nem lesz teljesen diagonális. Ha az állapotok jelölésére bevezetjük a  $^{2S+1}L_J$  jelölést, ahol  $S$  a teljes kétnukleon spin,  $L$  a teljes pályamomentum,  $J$  a teljes impulzusmomentum, a következő állapotok lesznek

$$^1S_0, ^3P_0, ^3P_1, ^3P_2, ^1D_2, ^3F_2, ^3F_3, ^3F_4, ^1G_4, \dots$$

$$^3S_1, ^1P_1, ^3D_1, ^3D_2, ^3D_3, ^1F_3, ^3G_3, ^3G_4, ^3G_5, \dots$$

A paritásmegmaradás tétele értelmében ellentétes paritású állapotok között nem jöhet létre átmenet, az impulzusmomentum megmaradása pedig megköveteli, hogy csak azonos impulzusmomentumú állapotok között jöhet létre átmenet. Ha feltesszük, hogy az izospin is megmaradó mennyiség, nem jöhet létre átmenet szinglet páratlan és triplet páros, valamint szinglet páros és triplet páratlan állapotok között. Mindezen megkötések még nem minden állapot közötti átmenetet tiltanak meg. Létrejöhet átmenet a  $^3(J-1)_J$  és a  $^3(J+1)_J$  állapotok között. Így tehát az  $S$  mátrix az impulzusmomentum altérben tartalmazni fog a diagonális mentén  $2 \times 2$ -es al-mátrixokat, melyek a fenti  $^3(J-1)_J - ^3(J+1)_J$  átmeneteket leírják. Az időtükrözési invariancia és az unitaritás lehetővé teszik, hogy (adott  $J$  esetén) három valós paraméterrel írjuk le ezen  $2 \times 2$ -es mátrixokat.

Többféleképpen leírhatjuk ezeket a  $2 \times 2$ -es mátrixokat, a gyakorlatban azonban kettőt használnak. Mindkettő közös tulajdonsága, hogy ezeket az al-mátrixokat három mátrix szorzataként írják fel. Az ún. Blatt—Biedenharn (BB) módszer szerint:

$$\begin{pmatrix} \cos \varepsilon & -\sin \varepsilon \\ \sin \varepsilon & \cos \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{2i\delta_-} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta_+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varepsilon & \sin \varepsilon \\ -\sin \varepsilon & \cos \varepsilon \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$



míg a Stapp, vagy „bar” módszer szerint:

$$\begin{pmatrix} e^{i\bar{\delta}-} & 0 \\ 0 & e^{i\bar{\delta}+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos 2\bar{\varepsilon} & i \sin 2\bar{\varepsilon} \\ i \sin 2\bar{\varepsilon} & \cos 2\bar{\varepsilon} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\bar{\delta}-} & 0 \\ 0 & e^{i\bar{\delta}+} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Itt  $\delta_-$ ,  $\delta_+$ ,  $\varepsilon$  és  $\bar{\delta}_-$ ,  $\bar{\delta}_+$ ,  $\bar{\varepsilon}$  az a három valós paraméter, amely a két csatolt állapotot a BB, ill. a „bar” képben leírja.

A három mátrixot a következőképpen interpretálhatjuk: rendre leírjuk a kölcsönhatást a központi kis sugarú tartomány előtt, abban a tartományban és utána.

Mivel  $\delta_+$  és  $\delta_-$  (valamint  $\bar{\delta}_+$  és  $\bar{\delta}_-$ ) az azonos állapotok közti átmenetet írják le, míg  $\varepsilon$  (éppúgy, mint  $\bar{\varepsilon}$ ) a keveredést, azaz az egyik állapotból a másikba való átmenetet írják le, látható, hogy a keveredés a BB módszer szerint a külső, míg a „bar” módszer szerint a kis hatótávolságú tartományban zajlik le. Éppen ezért a „bar” paramétereknek a BB paraméterekkel szemben sok előnyük van. Az egyiket, nevezetesen azt, hogy „bar” paraméterek esetén a tiszta nukleáris fázisokat a kísérletileg nyert teljes fázisokból egyszerűen a Coulomb fázisok kivonásával nyerjük, már említettük, ez a BB esetben nem tehető meg. A „bar” paraméterek zérushoz tartanak, ha a szórási mátrix zérushoz tart, ez a BB paraméterekre szintén nem igaz. Ezért gyakorlatilag leginkább a „bar” paramétereket használják.

Ezen kis kitérés után térjünk vissza ahhoz a ponthoz, ahol arról volt szó, hogy az erős kölcsönhatásnak elég jól definiált rövid hatótávolsága van. Ennek egy másik nagyon fontos következménye is van. Tekintsük a szórási folyamatot fél-klasszikusan. Ekkor, ha a bejövő részecske impulzusa  $p$ , ütközési paramétere  $r$ , akkor impulzusmomentuma  $pr$ . Ha a kölcsönhatás hatótávolsága  $b$ , akkor  $r$  nem lehet nagyobb  $b$ -nél, ellenkező esetben a beeső részecske már nem „érzi” a kölcsönhatást. Így van egy maximális impulzusmomentum,  $l_{\max} = pb$ , melynél nagyobb impulzusmomentumú részecskék esetén a kölcsönhatás feltehetően kicsi. Ezek szerint tehát (2.1)-ben az összegzést  $l_{\max}$ -nál abbahagyhatjuk, ahelyett, hogy a végtelen sok tagot figyelembe vennénk. Ezzel viszont (2.1) már gyakorlatilag használhatóvá válik. Az  $l_{\max}$  felső határ annál nagyobb, mennél nagyobb energiánál vagyunk, de ha feltesszük, hogy  $b$  kb. 1 fermi és a két nukleon kölcsönhatást csak 400 MeV-ig vizsgáljuk, úgy  $l_{\max}$  nem lesz nagyobb 5-nél, tehát az impulzusmomentum állapotok száma még a spinek okozta bonyodalmakat is figyelembe véve sem lesz túl nagy.

A fenti megfontolások mégsem túl pontosak, ugyanis a hatótávolság fogalma még erős kölcsönhatás esetén sem egzakt. Pontosabban, lehet, hogy az  $l_{\max}$  feletti impulzusmomentumállapotok járuléka kicsi, mégis mivel ilyen állapot végtelen sok van, lehetséges, hogy teljes járulékuk már tekintélyes. Hogy az adott  $l_{\max}$  utáni tagok elhagyása jogos-e, ennek egyik próbája az, hogy az ily módon kapott értékek mennyire stabilisak  $l_{\max}$  kis változtatása esetén. Valójában az ilyen próba sem ad mindig megnyugtató eredményt, mivel a fázisok értéke tekintélyesen megváltozhat  $l_{\max}$  értékétől függően. Ezek a bizonytalanságok megerősítik azt a gyanúkat, hogy a fent vázolt, fázisok segítségével véghezvitt leírás kevésbé megbízható fenomenológikus módszer, mint az I. fejezetben leírt módszer, azaz az invariáns amplitúdók direkt meghatározása.

Kétnukleon kölcsönhatás esetén van a fázisanalízisnek egy fél-fenomenológikus kiterjesztése, mely sikeresen megkerüli azokat a nehézségeket, melyek a magasabb impulzusmomentumú állapotok elhagyásából erednek. Ezt az ún. módosított fázisanalízist egy későbbi fejezetben tárgyaljuk. Gyakorlatilag az összes jelenleg használt fázisanalízis ilyen módosított típusú. A későbbiek során tárgyalni fogjuk részleteseb-



ben a jelenlegi fázisanalíziseket. Sajnos a módosított analízis nem minden erős kölcsönhatási reakcióra alkalmazható, mivel erősen függ az egyes reakciókban fellépő kicserélési mechanizmustól, és ezek reakcióról reakcióra változnak. A kétnukleon esetben azonban a módosított analízis alkalmazásának feltételei majdnem ideálisak.

Mint már az előbb említettük, magasabb energiáknál, azaz 500 MeV és 1 GeV között a fázisanalízis elveszti előnyeit az invariáns amplitúdók direkt meghatározásához képest, mivel már  $I_{\max}$  értéke egyre nagyobb és komplex fázisok is fellépnek. Hogy a gyakorlatban melyik módszer kezelhető könnyebben, az sok mindentől függ, beleértve a polarizációs technika fejlettségét is. Érdekes lenne tanulmányozni, hogy magasabb energia tartományban a két módszer hogy viszonylik egymáshoz a mezon-gyárak tervezésével kapcsolatban is.

## IRODALOM (II. fejezet)

- [1] P. L. Csonka, M. J. Moravcsik and M. D. Scadron, *Phys. Rev.* 143, 1324, 1966.
- [2] Lásd pl. M. H. McGregor, M. J. Moravcsik and H. P. Stapp, *Annual Rev. of Nucl. Sci.* 10, 291, 1960.
- [3] Lásd [2] hivatkozást, valamint H. P. Stapp, T. J. Ypsilantis and N. Metropolis, *Phys. Rev.* 105, 302, 1957.
- [4] Ennek, valamint ezen fejezet más pontjainak részletesebb tárgyalását lásd M. J. Moravcsik: *The Two-Nucleon Interaction*, Clarendon Press, 1963.

## III. Potenciálok

A kétnukleon kölcsönhatás leírására még egy másik formalizmus, a potenciálformalizmus is használatos. Több okot is felsorolhatnánk, miért népszerű ez a formalizmus.

Először is, a potenciál fogalma a fizika több ágában elég sikeresnek bizonyult. A gravitációs és elektromágneses jelenségek egyszerű leírását adta, és a mechanikában is széles körben alkalmazták. Ezért érdemes kipróbálni, vajon erős kölcsönhatás esetén működik-e.

Másrészt a magyszerkezeti számításokat általában a potenciálformalizmus segítségével végzik, mivel az off energy shell kölcsönhatások leírására a potenciálkép szinte automatikus receptet ad. Így magyszerkezeti számítások esetén a kétnukleon kölcsönhatás leghasználhatóbb leírását a potenciálkép adja.

Mégis, ha potenciálokkal dolgozunk, már a kezdettől fogva sok probléma merül fel. Az egyik ezek közül, hogy potenciáloknak csak akkor van értelmük, ha azokat valamilyen egyenletbe be tudjuk építeni. Szokásos skalárpotenciál esetén ez az egyenlet a Schrödinger egyenlet, mely nem relativisztikus. Ha a relativisztikus Bethe—Salpeter-egyenletet kívánjuk használni, vagy a potenciálnak valamilyen kovariáns alakjára van szükségünk, vagy a Bethe—Salpeter-egyenlet nem-relativisztikus esetre redukált alakját kell használniunk. Bármely megoldást választjuk is, a skalár potenciál rosszul definiálttá, vagy legalább is többértelművé válik relativisztikus energiáknál. 100 MeV alatti nukleon-nukleon szórás esetén ez még nem okoz komoly problémát, de az 500 MeV—1 GeV energiatartományban, ahol sok kísérleti eredmény várható a következő évtizedben, ezekről a bizonytalanságokról nem szabad elfelejtenünk.

A potenciálok általános alakját általános szimmetriamegfontolásokból meg-



határozhatjuk, éppúgy mint ezt az  $M$ -mátrix általános alakjának meghatározásával tettük [1]. Megköveteljük, hogy a potenciál legyen forgatási-, tükrözési- és rotáció-invariáns, valamint, hogy csak a *relatív* térkoordinátáktól függjön (azaz Galilei invariáns legyen). Továbbá kikötjük, hogy a két nukleon felcserélésével szemben is szimmetrikus legyen, azaz feltesszük a töltésfüggetlenséget. Ily módon a potenciál olyan skalár mennyiség lesz, melyet a két nukleon spinjéből, relatív távolságukból és relatív impulzusukból, azaz a  $\vec{\sigma}_1$ ,  $\vec{\sigma}_2$ ,  $\vec{r}$  és  $\vec{p}$  vektorokból és ezek vektorszorzatából építünk fel. Mivel  $\vec{\sigma}$ -k valójában pszeudovektorok, a potenciál kifejezésének minden egyes tagjában a fellépő  $\vec{\sigma}$ -k és a vektorszorzatok száma összesen páros kell legyen. Továbbá minden egyes tag együtthatója függvénye lehet  $r^2$ ,  $p^2$  és  $(\vec{r} \times \vec{p})^2 = L^2$ -nek. Ha megvizsgáljuk, hogy a fenti vektorok összes skalár kombinációja hogyan viselkedik időtükrözéskor és a részecskék felcserélésével szemben, akkor azt találjuk, hogy a potenciál legáltalánosabb alakja a következő lehet:

$$\begin{aligned}
 V = & U_1(r^2, p^2, L^2) + W_1(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 + \\
 & + [U_2(r^2, p^2, L^2) + W_2(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + \\
 & + [U_3(r^2, p^2, L^2) + W_3(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r} \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r} + \\
 & + [U_4(r^2, p^2, L^2) + W_4(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) (\vec{r} \times \vec{p}) + \\
 & + [U_5(r^2, p^2, L^2) + W_5(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r} \times \vec{p}) (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r} \times \vec{p}) = \quad (3.1) \\
 = & U_C(r^2, p^2, L^2) + W_C(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 + \\
 & + [U_S(r^2, p^2, L^2) + W_S(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + \\
 & + [U_T(r^2, p^2, L^2) + W_T(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] \left( \frac{3}{r^2} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r} \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r} - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \right) + \\
 & + [U_{LS}(r^2, p^2, L^2) + W_{LS}(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{r} \times \vec{p} + \\
 & + [U_Q(r^2, p^2, L^2) + W_Q(r^2, p^2, L^2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] [(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{r} \times \vec{p}]^2, \quad (3.2)
 \end{aligned}$$

ahol a (3.2) alatt felírt kifejezés a szokásosabb, itt a potenciált centrális, spinfüggő, tenzor, spinpálya valamint négyzetes spin-pályatagokból építettük fel.

A (3.1), ill. (3.2) alatt felírt potenciálkifejezések még olyannyira általánosak, hogy a fizikai folyamatokba aligha adnak mélyebb bepillantást, ill. azok leírása nem sokkal gazdaságosabb ezzel a formalizmussal, mintha energia és szög függvényében táblázatba foglalnánk az invariáns amplitúdókat, vagy energia és impulzummomentum állapotok szerint kitabelláznánk a fáziseltolásokat. Ezért azt szeretnénk, ha kimondhatnánk, hogy a potenciál (3.1) ill. (3.2)-ben felírt kifejezésében a 10 együtthatófüggvény jó közelítéssel nem függ  $L^2$ -től, és  $p^2$ -től. Ez bizonyos határig lehetséges, mint azt pl. a Hamada—Johnston [2], vagy a Yale-potenciál [3] mutatják. Másfelől viszont néhány Reid-potenciál [4], melyeknél az  $L^2$  függés megengedett, a kísérleti adatokat jobban fitteli, és bizonyos jelekből arra is következtethetünk, hogy egy olyan potenciál, amely az  $^1S$  és  $^1D$  állapotokat együttesen jól leírja, energiafüggő, (azaz nem lokális) kell legyen [5]. Mindent egybevetve mondhatjuk tehát, ahhoz, hogy a kétnukleon kölcsönhatásnak akár még 400 MeV alatt is jó leírását kapjuk,



a potenciál felírásánál ki kell használnunk azt a teljesen általános formát, melyet az általános szimmetriák engedtek meg.

A fentiekben vázolt helyzetet többféleképpen magyarázhatjuk, melyek közül most kettőt megemlítünk. Az egyik magyarázat, hogy a kétnukleon kölcsönhatás, tekintettel arra, hogy erős kölcsönhatás, eredendően komplikált, tehát a potenciál formájának egyszerűsítéséről le kell mondanunk. A másik nézet szerint a természet mindig egyszerű, ha megfelelő szemszögből nézzük, ezek szerint tehát potenciál formalizmust használva „rossz szemszög”-ből nézzük a kétnukleon problémát. Az utóbbi magyarázatot némileg alátámasztják a sikeres részecske kicserélő modellek, melyeket egy későbbi fejezetben tárgyalunk. Ezek a modellek a kétnukleon kölcsönhatást legalább olyan jól leírják, mint a fenomenologikus potenciálok, előnyük, hogy sokkal ökonomikusabbak és esztétikusabbak.

Mivel azonban a magfizikában szívesen használják a kétnukleon kölcsönhatás leírására a potenciálformalizmust, ez a módszer feltehetőleg tovább fog fejlődni, és bizonyára lehetőség lesz arra, hogy legalább nem relativisztikus energiáknál olyan potenciálokat írjanak fel, melyek tömörebbek és a kétnukleon kölcsönhatást pontosabban leírják.

Eddig még nem beszéltünk a 10 amplitúdó  $r^2$  függéséről. A legtöbb fenomenologikus potenciál két közös vonással rendelkezik e tekintetben:

a) Lényeges  $|\vec{r}|$  függésüket különböző hatótávolságú (különböző  $a$ -jú) Yukawa típusú tag  $(\exp(-ar)/r)$  adja meg.

b) Valamilyen típusú taszító törzset tartalmaznak.

Az első tulajdonság a mezonelméletből ered, mint azt egy későbbi fejezetből látni fogjuk. A használatos fenomenologikus potenciálok és a mezon elmélet közti kapcsolat azonban elég bizonytalan és kvalitatív, mivel csupán azt az általános ötletet vették át, hogy a potenciálok *lényeges* távolságfüggését *néhány* különböző hatótávolságú Yukawa függvény összege határozza meg.

Ezért a legtöbb fenomenologikus potenciál radiális függése csupán halványan emlékeztet a mezon elméletből számított radiális függésre. Ezért érdekes lehet megkísérteni olyan fenomenologikus potenciál felírását, mely nem kötődik kezdettől fogva a Yukawa formához. Ilyen jellegű munka folyamatban van [6].

Ami a taszító törzset illeti, ez a probléma a magfizikusokat közelről érinti. Egy ilyen erős taszítás jelenléte, mint később látni fogjuk, a két nukleon kölcsönhatás megértésében nagy segítséget jelent. Magszerkezeti számolásokhoz azonban fontos tudnunk, ez a taszító törzs véges-e vagy végtelen, azaz soft-core vagy hard core van-e. Ugyanis, amennyiben végtelen a taszító törzs, azaz hard core van, a magszerkezeti számításokban némi nehézség merül fel. Valójában a sikeres fenomenologikus kétnukleon potenciálok közül néhány végtelen taszító törzssel rendelkezik [2], mondhatjuk, hogy inkább kényelemből, mint szükségszerűségből. Ugyanakkor mostanában többen sikerrel kíséreltek meg felírni fenomenologikus potenciálokat soft core-ral. Nagyon valószínű, hogy a mostani kísérleti adatok, melyek csak 400 MeV-ig terjednek, valójában nem adnak pontos információt a potenciál kis távolságon belüli viselkedéséről, és magasabb energiák (500 MeV—1 GeV), valamint mezon-gyarak szükségesei ahhoz, hogy információkat nyerjünk [8]. Ennek a kérdésnek részletesebb tanulmányozására volna szükség.

Ezzel kapcsolatban a magszerkezettel foglalkozó embereket érdeklő — másik megválaszolatlan kérdést is meg kell említenünk. Nem egészen tisztázott, hogy a potenciálnak mely része, mind a spintől függést, mind pedig a távolságfüggést



tekintve, lényeges valójában a mag tulajdonságainak számításánál. Valóban lényeges-e fizikai szempontból a taszító törzs alakja? Valóban fontos a magszerkezet-számításoknál a 400 MeV feletti nukleon-nukleon kölcsönhatás ismerete? E tekintetben nagyon hasznos volna akár analitikus érveléssel, akár numerikus modell-számításokkal eldönteni ezt a kérdést, hiszen befolyásolhatná a következő tíz évben végzendő kísérletek típusát különösen a mezongyárakban. A magszerkezeti számítások szempontjából másik lényeges kérdés, ha a kétnukleon kölcsönhatást potenciálformalizmussal írjuk le, valóban helyesen kapjuk-e meg az *off energy shell* kölcsönhatást. Ennek egyik próbája természetesen maga a magszerkezeti számolás, de ezekben a számításokban sok egyéb bizonytalanság is van, melyeket nehéz egymástól elválasztani. Az *off energy shell* kétnukleon kölcsönhatást tanulmányozhatjuk úgy is, hogy nukleonok ütközésekor keletkező pionokat tanulmányozzunk, de itt az erős végállapotú kölcsönhatás a pion és az egyik nukleon között elfedi az eredményt. Ennél sokkal jobb, és az utóbbi időben sokat tanulmányozott reakció ad a fenti kérdésre felvilágosítást, nevezetesen a nukleon-nukleon fékezési sugárzás [9], azaz a  $N + N \rightarrow N + N + \gamma$  folyamat. Itt lehetőség nyílik arra, hogy lemenjünk az energia héjról anélkül, hogy erős kölcsönható végállapotba jutnánk, és jó közelítéssel úgy tekinthetjük a folyamatot, mint egy *off energy shell* kölcsönhatást, melyhez egy ismert  $N - \gamma$  vertex kapcsolódik. Ez természetesen nem teljesen igaz, mivel a fotont egy pion is emittálhatja, és ez a diagram már nem írható le két nukleon potenciállal és foton vertexszel. Ez a probléma, valamint néhány technikai nehézség az oka annak, hogy a két nukleon fékezési sugárzás számítását messze nem tekinthetjük triviálisnak. Mégis, erre vonatkozó kísérletek és számítások már rendelkezésünkre állnak. Ha az energia-héjat csak kicsit hagyjuk el, általános alacsonyenergiás tételek adnak modellfüggetlen előzetes becslést, így a kísérletek semmi felvilágosítást nem adnak a potenciálról. Ugyanakkor magasabb fotonenergiáknál a kísérlet és az elmélet eredményei összehasonlíthatók. Jelen pillanatban nincs határozott eltérés a kísérlet és az elmélet között, de az egyezés is csupán 20%-os. Ahhoz, hogy végleges következtetéseket vonhassunk le, több kísérletre és további elméleti munkára van szükség.

Végezetül nem szabad elfeledkeznünk arról, hogy a kétnukleon kölcsönhatás természetesen csak a *kétnukleon* erőkről ad felvilágosítást. Ha léteznek eredendő *háromtest* erők, azaz nem olyan háromtest erők, melyek szimultán kétnukleon kölcsönhatások eredői, akkor elképzelhető, hogy a magszerkezeti számításokban ezeknek szintén fontos szerepük van, de a nukleon-nukleon szórás ezekre semmiféle felvilágosítást nem fog adni. Eddig nem adták még semmi meggyőző bizonyítékát ilyen háromtest erők létének a magszerkezeti számítások, de az ilyen számolások számos egyéb bizonytalansága miatt a problémát még nem tekinthetjük lezártnak.

A potenciálmodellek tárgyalása nem lenne teljes anélkül, hogy a boundary condition modellről (BCM) [10], mely a potenciálmodellek egyik fajtája lett, nem beszélnénk. Eredetileg a BCM megkísérelte a kétnukleon kölcsönhatást a hullámfüggvények logaritmikus deriváltjai segítségével leírni. Ezen formalizmus mögött a következő fizikai kép van: a szórási folyamat komplikált részletei, melyek egy kis sugarú „fekete doboz” belsejében játszódnak le, nem szükségesek ahhoz, hogy a szórási folyamat kísérleti eredményeit, melyek csupán az *aszimptotikus* hullámfüggvényre vonatkoznak, leírjuk. Így a „fekete dobozon” belüli folyamatok szempontunkból lényeges részét leírhatjuk úgy, hogy a hullámfüggvények logaritmikus deriváltjának értékét a fekete doboz felületén adjuk meg.



Ha különböző impulzusmomentum állapotok esetén különböző határfeltételeket engedünk meg, akkor ezek a határfeltételek energiafüggők lehetnek, és így ez a formalizmus teljesen általánossá válik, ekvivalens lesz a fázisformalizmussal. Ugyanakkor viszont igen nagyszámú paramétert tartalmaz. Ha a képet egyszerűsíteni akarjuk, feltehetjük, hogy a határfeltételek energiafüggetlenek, és mindegyik határfeltételt kb. ugyanarra a távolságra adjuk meg. Ebben az esetben azonban a modell kétnukleon szórási adatokat nem jól fitteli, és így kénytelenek vagyunk a határfeltételeken kívül még potenciálokat is megadni, melyek a felületen kívül érvényesek. Ebben a formájában ez a formalizmus hasonló a taszítótörzzsel rendelkező potenciálformalizmushoz. A mezonelmélettel kapcsolatban még több szó esik majd erről a modellről. Érdekes lesz látni, hogy magasabb energiatartomány (500 MeV—1 GeV) adatai a BCM-mel leírhatók, mégpedig akkor is, ha a határfelületet az alacsony energiáknál felvett távolságban adjuk meg.

### IRODALOM (III. fejezet)

- [1] Részletesebben lásd *M. J. Moravcsik* The Two Nucleon Interaction, Clarendon Press, 1963, 2. fejezet.
- [2] *T. Hamada* and *I. D. Johnston*, Nucl. Phys. 34, 382, 1962; *T. Hamada*, *Y. Nakamura* and *R. Tamagaki*, Prog. Theor. Phys. 33, 769, 1965.
- [3] *K. E. Lassila et al*, Phys. Rev. 126, 881, 1962.
- [4] Lásd *P. C. Bhargawa* and *B. W. L. Sprung*, Ann. Phys. 42, 222, 1967. Appendix B. A. Reid potenciálnak több változata van.
- [5] Ezt *H. P. Noyes* több konferencián hangsúlyozta.
- [6] *S. Stone* (magánközlemény).
- [7] *C. N. Bressel*, MIT tézis (kiadatlan); *C. N. Bressel et al*, Bull. Am. Phys. Soc. 10, 584, 1965; lásd még *P. C. Bhargawa* and *D. W. L. Sprung* Ann. Phys. 42, 222, 1967, Appendix B.
- [8] A mezongyarak kétnukleon kölcsönhatási problémabeli szerepének részletes tárgyalását lásd *M. J. Moravcsik*: Meson Factories and the Two-Nucleon Problem, jelentés a Summer Study Group on Physics Uses of LAMF csoporttal folytatott tárgyalásokról, Los Alamos, 1968 (kiadatlan).
- [9] *A. H. Cromer* and *M. I. Sobel*, Phys. Rev. 152, 1351, 1966 és 162, 1174, 1967; *P. Signell* and *D. Marker*, Phys. Lett. 26B, 559, 1968; *V. Brown*, Phys. Lett. 25B, 506, 1967 és Phys. Rev. 177, 1498, 1969; *W. A. Pearce et al*, Nucl. Phys. B3, 241, 1967; *Y. Meda*, Phys. Rev. 145, 1214, 1966; *D. Drechsler* and *L. C. Maximon*, Phys. Lett. 26B, 477, 1968.
- [10] *H. Feshbach* and *E. Lomon*, Annals of Phys. 29, 19, 1964, *H. Feshbach*, *E. Lomon*, and *A. Tubis*, Phys. Rev. Lett. 6, 635, 1961; *M. M. Hoenig* and *E. Lomon*, Annals of Phys. 36, 363, 1966; *E. Lomon* and *H. Feshbach*, Rev. Mod. Phys. 39, 611, 1967.



### IV. Mezon elmélet

Az eddigiekben a kétnukleon kölcsönhatás fenomenologikus leírásával foglalkoztunk, melyet vagy csupán nem-dinamikai feltevésekre (azaz megmaradási tételekre), vagy részben a dinamika kvalitatív jellemzőire (mint a rövid hatótávolság), alapoztunk. Most olyan elméletekkel foglalkozunk, melyek a kétnukleon kölcsönhatás részletes dinamikáját foglalják magukban.

A kétnukleon kölcsönhatás elméletének középponti ötlete a részecske csere [1], mely kivétel nélkül mindegyik modell vezérgondolata. Eredetileg Yukawa ötlete volt, hogy ha az elektromágneses erőket tulajdoníthatjuk zérus tömegű részecskék (fotonok) cseréjének, és az így kapott potenciál  $1/r = e^{-\alpha r}/r$  alakú, úgy az erős kölcsönhatást is tekinthetjük részecske (v. részecskék) kicserélődéséből eredőnek, az így kapott potenciál (vagy potenciálok)  $\exp(-\mu r)/r$  alakúak, ahol  $\mu$  az egyes részecskék



tömege. Ez az elmélet az erők rövid hatótávolságát automatikusan kiadja. Ha a hatótávolságról feltesszük, hogy 1–2 fermi nagyságrendű, a kicserélődő részecske tömegére 100–200 MeV-et kapunk. Mint ismeretes, először hamis nyomon indultak, később azonban sikerült a nukleon-nukleon kölcsönhatás során kicserélődő részecskét a pionnal azonosítani.

A fentiekben vázolt elképzelések kvalitatívak, és nincs más hátra, mint egy kvantitatív elméletet csinálni belőlük. Ez a kísérlet már 30 éve tart, és annak ellenére, hogy jelentős sikereket könyvelhetünk el, melyeket az alábbiakban tárgyalunk, még mindig nem teljes az eredmény. Mik a nehézségek?

A lehető legegyszerűbb folyamat, amit elképzelhetünk, hogy a nukleon-nukleon kölcsönhatás során egy pion cserélődik. Mivel a pion pszeudoskalár részecske, a pioncserével generált potenciál nem annyira egyszerű, mint a fent említett Yukawa potenciál, bár lényeges távolságfüggése valóban Yukawa függvénnel írható le. Ugyanakkor spinfüggő és tenzor része is van, ez utóbbi tagban még a Yukawa függvényt  $1/r$ -nek további hatványaival szorozzuk. Mindazonáltal minden különösebb nehézség nélkül számolhatunk vele, így az egypion cserés folyamatokat ismerteknek tekinthetjük.

Lehetséges azonban, hogy a nukleonok két, három, vagy akár több piont cserélnek. A kétpion cserés folyamatokat először térelméleti módszerekkel, később diszperziós technikával számolták, de az eredmények nem voltak meggyőzőek. Még reménytelenebb a három vagy több piont cserélő folyamatok számítása.

Első pillantásra úgy tűnik, hogy a kétnukleon erő számítására irányuló törekvések halálos ítéletét mondtuk ki, mivel a pion és a nukleonok közti csatolás erős, tehát nincs okunk feltenni, hogy a kétpion cserés folyamatok kisebb járulékot adnak, mint az egypion cserés folyamatok.

A kétpion cserés folyamatoknak mégis van egy olyan vonásuk, amely kicsit kedvezőbbé teszi a helyzetet. Bár a kétpion cserés folyamatokat exakte nem tudjuk számolni, megbízható becslést adhatunk arra, hogy radiális függése közelítőleg  $\exp(-2\mu_\pi r)/r$  alakú, ahol  $\mu_\pi$  a pion tömege. Így legalább nagy távolságoknál elhanyagolhatóvá válik, ahol tehát csak a számítható egypioncserés járulék dominál.

Ezt a tulajdonságot nagyon sokféleképpen ki lehet használni. BCM esetén [2] pl. a határfeltételt magát kiegészíthetjük nagy távolságoknál az egypiont cserélő potenciállal, így a kísérleti adatok jobb leírásához jutunk. A leírás még így sem túl jó, mivel még jóval azelőtt, hogy a határfeltételt alkalmaznánk, azaz elérnénk a kis távolságokat, már elhagyjuk azon nagy távolságok tartományát, ahol az egypion csere dominál, és így ahhoz, hogy a BCM az adatokat jól fittelje, némi információra van szükségünk a kétpion cserével kapcsolatban is.

Az egypion csere nagy távolságú dominanciájának másik alkalmazása a II. fejezetben leírt módosított fázisanálízis. Láttuk, hogy a fázisanálízisben bizonyos nehézségek lépnek fel amiatt, hogy a sorfejtést  $J_{\max}$ -nál megszakítjuk. Mivel nagy impulzusmomentumok nagy ütközési paraméterekkel vannak kapcsolatban, azaz a kölcsönhatás hosszú hatótávolságú részével, természetesnek látszik megkísérelni, hogy a  $J_{\max}$ -nál magasabb impulzusmomentumú állapotok járulékát egypion cserés járulékkal helyettesítjük. Valójában a teljes egypion cserés járulék (az összes impulzusmomentum állapotra való vetülettel együtt) zárt alakban írható. Ezt egyszerűen (2.1)-hez adva az első  $J_{\max}$  impulzusmomentum állapotban az egypion cserés járulékot kétszer vennénk tekintetbe, mivel a teljes fázisok, ahogy azokat (2.1)-ben felírtuk, tartalmazzák az egypion cserés járulékot is. Ezért, miután az egypion cserés járulékot



(2.1)-hez zárt alakban hozzáadtuk, ennek az első  $J_{\max}$  állapotra vett vetületét le kell vonnunk. A végső kifejezés szabad paraméterként fogja tartalmazni az első,  $J_{\max}$ -ig terjedő állapotok fázisát, valamint a pion tömeget és a csatolási állandót. Az utóbbi kettő természetesen valójában nem teljesen szabad paraméter, értéküket már előzetesen meghatároztuk, és így az a tény, hogy a legjobb fittet akkor kapjuk, ha ez a két paraméter az előre meghatározott értéket veszi fel, a módszer belső igazolásának tekinthető. A fázisanalízisnek ezen változatát nevezik módosított fázisanalízisnek. A konvencionális fázisanalízisekkel szemben tekintélyes előnye van, ugyanis a fit jobb, nincs tetszőlegesség, és több a fizikai tartalma is, ezért a nukleon-nukleon szórással kapcsolatban utóbbi időkben végzett fázisanalízisek mind módosítottak.

Az egypion cserés járulék meghatározása és felhasználása azonban még nem jelenti, hogy a kétnukleon problémát megoldottuk. Még meg kell birkóznunk a két és több piont cserélő folyamatok leírásával, ha a kölcsönhatást kisebb távolságokon is meg akarjuk ismerni. Ebben a tekintetben egy igen fontos kísérleti tény segít minket át a nehézségeken. Ez a kísérleti tény messzemenő következményekkel jár a részecskefizika más területén is, és számos egyéb folyamat közelítő számítását is lehetővé tette. Kiderült ugyanis, hogy az elemi részecskék egy csoportja szívesen viselkedik az idő nagy részében úgy, hogy rezonanciaállapotot képeznek jól meghatározott tömeggel és kvantumszámokkal.

Részletesebben [4], két és három pion-ból álló csoportok szívesen viselkednek úgy, hogy  $\rho$ ,  $\omega$  és  $\eta$  részecskéket alkotnak 750, 780, ill. 550 MeV tömeggel, 1, 1, 0 spinnel, 1, 0, 0 izospinnel, valamint  $-$ ,  $-$  és  $-$  paritással. A háropion rezonancia kb. 1000 MeV tömegű, ez az ún.  $\phi$  rezonancia. Így jó közelítéssel kiszámíthatjuk a kétnukleon erők két- ill. háropioncserés járulékát a folyamatot úgy tekintve, hogy a kétnukleon a fenti rezonanciákat cseréli ki. Ezeket az egyrészecskét cserélő járulékokat pontosan számíthatjuk, éppúgy mint az egypion cserét. Így jó közelítéssel megkapjuk a háropioncserés járulékot is magában foglaló kétnukleon erő leírását.

De hogyan lépünk tovább? Jelen pillanatban négy- vagy magasabb számú pionrezonanciák nem ismertek, így a fenti „trükk” tovább már nem alkalmazható. Itt tehát ismét kihasználjuk a hatótávolsággal kapcsolatos érvelést, valamint a vektormezonjárulékok egy meglepő tulajdonságát. Ugyanis a négy pion cserés járulékot kb. 0,35 ferminél várhatjuk. Ugyanakkor a vektormezonjáruléknak erős taszító törzse van kb. 0,6 ferminél. Ennek a taszító törzsnek két okból örülünk nagyon. Egyrészt, mert megegyezik a fenomenologikus potenciáloknál talált taszító törzsszel, másrészt, mert a kis távolságú, magasabb mezonjárulékokat elfedi, bármilyenek legyenek is azok, egészen addig, míg azok erősen vonzóvá nem válnak. Így gyakorlatilag nem kell meghatároznunk ezeket a magasabb járulékokat, és így a kétnukleon problémát közelítőleg megoldottnak tekinthetjük.

Megegyeznek-e az így számított egyrészecske cserélő járulékok a kísérleti eredményekkel? Ha az összehasonlítást elvégezzük, azt találjuk [5], hogy ha elfogadható egyezést akarunk, szükségünk van még egy nehéz mezonra, egy kb. 400 MeV tömegű skalár részecskére. Ilyen részecskét eddig még nem ismerünk, bár létéről időről időre hírek keringenek. Ezért lehetséges tehát, hogy az ún.  $\sigma$  részecske csupán jó helyettesítő leírása a nem rezonáló (korrelálatlan) pionok járulékának.

Eltekintve a  $\sigma$  részecske használatától, még egy sor bizonytalanság van az elméletben. A különböző részecskék tömegét és csatolási állandóját szabad paraméterként kell tekintenünk, bár a tömegek direkt kísérleti mennyiségek és a csatolási állandók értékének meg kell egyeznie azokkal az értékekkel, melyeket más reakciókból



kaptunk. Mivel azonban a nehéz mezonok nagyon rövid életűek, és így a szélességük tekintélyes (néhány esetben kb. a tömeg 20%-a), megérthetjük tehát, hogy a számításokban használt tömegértékben némi fluktuáció van. Ha azonban mindig ugyanazt az értéket használjuk, új bizonytalanság lép fel, mivel az egyrészecske-járulékokat úgy számítjuk, mintha a kicserélt részecskék stabilak lennének, azaz zérusszélességű közelítésben. Lehetséges, hogy a véges szélességgel kapcsolatos még nem ismert korrekciók elég számottevők.

Eltekintve ezektől a nehézségektől, mégis megkísérrelhetjük a tömegeket és a csatolási állandókat fittelni a kísérleti adatokhoz. Nyilvánvaló, hogy ilyen fit esetén sokkal kevesebb paraméterünk lesz, mint a fenomenologikus potenciálok, vagy a fázisanalízis esetén. Az is nyilvánvaló, hogy ha nehézségünk lesz, az kis távolságoknál lép fel, ahol az összes nehéz mezon effektusa a legerősebb. Így amikor részecske-kicserélő modelleket fitteltünk a kísérleti adatokhoz, az  $S$ -hullámot leválasztották és fenomenologikus fázissal helyettesítették, mivel azt várjuk, hogy az  $S$ -hullám a legérzékenyebb a rövid távolságú kölcsönhatásra. Más fittelésnél azonban az  $S$ -hullámot sem választották le. Az így nyert fittek meglepően jók, ezért nehezen kerülhetjük el azt a megállapítást, hogy az egyrészecske kicserélődési leírási mód jó közelítéssel valóban jó leírása a kétnukleon problémának. Ezzel tehát az eredeti Yukawa elképzelés teljes eredménnyel megvalósult.

Az egyrészecske kicserélő formalizmust kifejezhetjük bármely fenomenologikus formalizmussal, melyeket az előző fejezetekben tárgyaltunk. Az eredmények elsődleges formájaként zárt kifejezést kapunk minden egyes mezon kicserélésének amplitúdójára. Általában ezek minden invariáns amplitúdóhoz, vagy a potenciál minden részéhez, vagy minden impulzusmomentumhoz tartalmaznak járulékot. Így tehát kiszámíthatjuk a különböző vetületeket, és megalkothatjuk az invariáns amplitúdókat, vagy a potenciált, vagy pedig a fázisokat. Magszerkezeti számítások szempontjából tehát lehetőségünk van arra, hogy a soktestprobléma számításokban egyrészecske kicserélő potenciált használjunk. Igen valószínű, hogy egy ilyen potenciál a kétnukleon kísérleti adatoknak nem lesz olyan jó leírása, mint a legjobb fenomenologikus potenciálok, de fizikailag jobban megalapozott. Ezenkívül, mint már korábban említettük, valószínűleg még nem tudjuk, hogy a mostanában használatos soktestprobléma módszerével véghezvitt számításokhoz mennyire pontos kétnukleon potenciál szükséges, így tehát valószínűleg egyébként is lényegtelen a különbség a mezonelméletből kapott potenciálok és a fenomenologikus potenciálok között.

Nagyon valószínű, hogy egy ilyen egyrészecske kicserélő formalizmus nem írja le a teljes fizikai képet még akkor sem, ha egy napon teljesen tisztába jövünk eredetével. A következő lépés valószínűleg nehéz lesz. Ismét próbálkoznak azzal [6], hogy a kétnukleon járulékot egyértelműen kiszámítsák a relativisztikus kétrészecske Bethe—Salpeter-egyenletet felhasználva, de a nehézségeket még nem hártották el teljesen. Azt azonban remélhetjük, hogy ha valamilyen módon sikerülne kiszámítanunk csupán a *korrelálatlan* kétrészecske járulékot, mely várhatóan kicsiny lesz, perturbációs módszert tudunk majd használni. Ez a probléma minden bizonnyal szoros összefüggésben van azzal az általános kérdéssel, hogyan kell a részecske fizikában ún. „non-pole” típusú folyamatokat számítani. Ebben az értelemben tehát ahhoz, hogy a magfizikát teljesen megalapozzuk elméletileg, szükségünk van arra, hogy az elemirész fizikát is teljesen megértsük.



## IRODALOM (IV. fejezet)

- [1] A mezonelméletek tárgyalásához lásd pl. *M. J. Moravcsik: The Two-Nucleon Interaction*, Clarendon Press, 1963, 3—7 fejezet, és *M. J. Moravcsik and H. P. Noyes, Annual Rev. of Nucl. Sci. 11, 95, 1961*; *P. Signell: Advances in Nuclear Physics*, Plenum Press, II. kötet (megjelenés alatt). A japán munkák kitűnő összefoglalását lásd: *Suppl. Progr. Theor. Phys., No. 39, 1967, pp. 1—346*.
- [2] Lásd III. fejezet [10].
- [3] *M. J. Moravcsik, UCRL-5317-T, 1958, (kiadatlan)*; *A. F. Grashin, J. Exp. Theor. Phys. 36, 1717, 1959*.
- [4] A részecskék tulajdonságainak legújabb összefoglalását lásd *N. Barash-Schmidt et al, Rev. Mod. Phys. 41, 109, 1969*.
- [5] *R. A. Bryan and B. L. Scott, Phys. Rev. 135B, 434, 1964; 164, 1215, 1967; 177, 1435, 1969*; *A. Scotti and D. Y. Wong, Phys. Rev. 138B, 145, 1965*; *D. Wong, Rev. Mod. Phys. 39, 622, 1967*; *P. Signell and J. Durso, Rev. Mod. Phys. 39, 635, 1967*; *A. E. S. Green and T. Sawada, Rev. Mod. Phys. 39, 594, 1967*; *H. Sugawara and F. van Hippel, Phys. Rev. 145, 1331, 1966*; *T. Sawada et al, Phys. Rev. 177, 1541, 1969*.
- [6] *M. H. Partori and E. L. Lomon, Phys. Rev. Lett. 22, 438, 1969 (errata: 22, 692 és 806)*.

## V. A jelenlegi helyzet összefoglalása

Hogyan foglalhatjuk tehát össze a kétnukleon probléma jelenlegi helyzetét [1]?

Kísérletileg a proton-proton szórást a 0—400 MeV energiatartományban jól ismerjük, úgyhogy képesek vagyunk egyértelmű kvalitatív leírását megadni bármely eddig tárgyalt formalizmus segítségével. Egészében véve a leírás kvantitatív is egész jó [2], bár néhány kis fázisnál még jelentős bizonytalanságok lépnek fel.

A neutron-proton szórásról már sokkal kevesebbet tudunk. 50 MeV alatt pl. még kvalitatív sem tudjuk egyértelműen meghatározni a fázisokat. Jelentős bizonytalanságok vannak az  $^1P_1$  és  $^3D_3$  fázisoknál 200 és 400 MeV között is. Mindezek a nehézségek akkor is fellépnek, ha feltételezzük a töltésfüggetlenséget, és a  $p-p$  fázisokat felhasználjuk az izotriplet  $n-p$  fázisoknál. Mindent összevetve, enélkül lehetetlen a kísérleti adatokból az  $n-p$  fázisokat meghatározni, és így jelenleg a töltésfüggetlenséget általánosan nem tudjuk ellenőrizni.

A neutron-neutron szórás kísérletileg tulajdonképpen ismeretlen. A magfizikában a töltésszimmetria eléggé megalapozott, de a szimmetriák érvényessége energiafüggő lehet, és így érdekes lenne direkt méréseket végezni az  $n-n$  szórásra. Erre lehetőség nyílik az  $n-d$  szórás vizsgálatánál, ahogy az  $n-p$  szórásra is kaphatunk információt a  $p-d$  szórásból. Másfelől alacsony energiáknál megvizsgálhatjuk az  $n-n$  szórást oly módon [3], hogy neutronnyalábokat ütköztetünk vagy nagy fluxusú reaktorban, vagy úgy, hogy ütköző nyalábokat képezünk földalatti nukleáris robbantásnál. Mindkét módszer még kezdeti stádiumban van.

400 MeV felett az információk még kevésbé teljesek [4]. Mérések csupán szórt energiáknál vannak, és még ott sem teljesek annyira, hogy néhány további, megalapozatlan feltevés nélkül információt nyernénk a kölcsönhatásra vonatkozóan. A mezonyárok létrehozása kétségtelenül sok információt fog nyújtani ebben a tartományban.

Mint már az előzőekben is hangsúlyoztuk, nagyon hasznos lenne a jövő kísérleteinek megtervezése szempontjából, ha valaki meg tudná mondani, hogy a ma szokásos magszerkezeti számolásokhoz milyen pontossággal kell ismernünk a kölcsönhatást az egyes energiáknál. Más okokból is tanulmányozni kell természetesen



a kétnukleon problémát, és így több irányból várható, hogy speciális igényeket jelentenek be a jövő kísérleteire vonatkozóan.

Mint már előbb említettük, az eddigi kísérleti eredményeket fázisok, potenciálok, ill. a BCM segítségével foglalták össze. Fázisanalízist a Livermore és a Yale csoport végzett [5]. Potenciálokat az utóbbi időben a Yale csoport [6], Reid [7], valamint mások [8] írtak fel. A BCM-et főleg az MIT-n tanulmányozták [9]. Az irodalomban ezen különböző leírások összehasonlítása is megtalálható [10].

Az egyrészecske kicserélő formalizmusnak jelenleg kiterjedt irodalma van [11]. A Texas AM csoport tovább dolgozik ezen a problémán. Ezekre a próbálkozásokra szintén végeztek kvantitatív összehasonlításokat [10]. Minden ilyen összehasonlítás függ azonban attól, hogy választották ki azokat a kísérleti adatokat, melyek segítségével az összehasonlítást végzik.

Ezen terület jövőbeni fejlődését a következő irányokban várhatjuk:

- a) 400 MeV alatt több teljes kísérleti eredmény
- b) Pontosabb  $p$ - $p$  és  $n$ - $p$  adatok 400 MeV alatt
- c) Alapos kísérletekkel adatokat felhalmozni  $p$ - $p$  és  $n$ - $p$  szórásra a 400 MeV-1 GeV tartományban
- d) Pontosabb  $p$ - $p$  fázisok 400 MeV alatt
- e) Egyértelmű és pontosabb  $n$ - $p$  fázisok 400 MeV alatt
- f) A fáziseltolások meghatározása a 400 MeV-1 GeV tartományban
- g) A jelenlegi potenciálok érvényességének ellenőrzése 400 MeV felett
- h) A taszító törzs méretének, keménységének és magasságának pontosabb meghatározása
- i) Annak tanulmányozása, hogy mennyire szükséges a potenciálok energiafüggését kiterjeszteni
- j) Annak vizsgálata, hogy a potenciálok radiális függése valójában mennyire írható le Yukawa függvényekkel
- k) Annak vizsgálata, hogy a kétnukleon kölcsönhatás milyen határig írható le az egyrészecske kicserélő modellel
- l) Megkísérelni két korrelálatlan pion kicserélésének járulékát kiszámítani
- m) Teljesebb, pontosabb és kiterjedtebb kísérletek a nukleon-nukleon fékezési sugárással kapcsolatban
- n) A nukleon-nukleon fékezési sugárzás fejlettebb számítása
- o) Váratlan fejlemények.



## IRODALOM

- [1] Általános, kvalitatívabb összefoglalást lásd: *M. J. Moravcsik*, Scientific American (megjelenőben). A probléma helyzetének részletesebb tárgyalása 1967-ig: *Rev. Mod. Phys.* 39, 495—716, 1967. Újabb keletű áttekintés: *P. Signell*, Advances in Nuclear Physics, Plenum Press, II. kötet (megjelenőben).
- [2] Az ezen információban rejlő hiányosságok tárgyalását lásd: *M. H. Mac Gregor et al*, *Phys. Rev.* 173, 1272, 1968.
- [3] Lásd pl. *M. J. Moravcsik*, *Phys. Rev.* 136, B624, 1964.
- [4] *M. H. Mac Gregor et al*, *Phys. Rev.* 169, 1149, 1968; 173, 1272, 1968.
- [5] Lásd pl. *R. E. Seamon et al*, *Phys. Rev.* 165, 1579, 1968; *M. H. Mac Gregor et al*, *Phys. Rev.* 135, B628, 1964; 139, B362, 1965; 139, B380, 1965; 141, 873, 1966; 154, 1549, 1967; 159, 1422, 1967; 169, 1128, 1968, és 173, 1272, 1968.
- [6] *K. E. Lassila et al*, *Phys. Rev.* 126, 881, 1962.
- [7] III. fejezet [4].
- [8] III. fejezet [7]. Az ún. szeparálható potenciálokra vonatkozóan lásd *F. Tabakin* *Phys. Rev.* 177, 1443, 1968, és ezen cikk [6] hivatkozása.
- [9] III. fejezet [10].
- [10] Lásd pl. *H. P. Noyes et al*, *Phys. Rev.* 159, 789, 1967, *M. D. Miller et al*, *Phys. Rev.* 176, 1724, 1968.
- [11] IV. fejezet [5].



# A KALCIUM, STRONCIUM ÉS BÁRIUM ELEKTRONSZERKEZETE\*

VASVÁRI BÉLA  
MTA ATOMKI, Debrecen\*\*

## TARTALOMJEGYZÉK

### Bevezetés

1. Kristályok szimmetriatulajdonságai és ezek néhány egyszerű fizikai következménye
  - 1.1. A tércsoport
  - 1.2. A tércsoport két alcsoportja: a pontcsoport és a translációs csoport. A translációs csoport irreducibilis előállításai
  - 1.3. A tércsoport irreducibilis előállításai, a sávok energiaszerkezete
  - 1.4. Szimmetrizált hullámfüggvények a BZ szimmetriapontjaiban
  - 1.5. A szabad elektron közelítés
  - 1.6. A közel szabad elektron közelítés, az egyszerű pszeudopotenciál approximáció
2. A kristálypotenciál
  - 2.1. A modell potenciál
  - 2.2. A szabályos ionrács potenciálja, a merev elektrontenger korrekciói
  - 2.3. Az elektrongáz leárnýékoló hatása
  - 2.4. A leárnýékolt modell potenciál a kalcium fém esetében

### Bevezetés

A disszertáció fő témája a kalcium fém energiasáv szerkezetének elméleti vizsgálata. E fém tulajdonságainak több oldalról való megvizsgálása mellett eredményeket kívánunk bemutatni további két kétvegyértékű fém, a stroncium és a bárium sávstruktúrájára vonatkozóan is.

A téma kiválasztásával kapcsolatban megemlíjtük, hogy a viszonylag egyszerű egyvegyértékű (alkáli-) fémek sávstruktúrájának már meglehetősen kiterjedt vizsgálatával találkozhatunk az irodalomban. E helyen csak Ham (1962) két cikkére szeretnénk utalni, mely szisztematikus, ugyanazon matematikai módszer segítségével végzett számításokat tartalmaz e fémek elektronszerkezetére és néhány ebből értelmezhető további jellemzőre vonatkozóan. Elég szép számmal találhatók a *nemesfémek* sáv szerkezetét vizsgáló dolgozatok is. A vizsgálatok e két iránya egyébként nyilvánvalóan tükrözi azt a fizikai tényt, hogy a fémek e két csoportja többé-kevésbé jól közelíthető két, már régebben is ismert és viszonylag egyszerű modellel, a közel szabad elektron modellel, illetve az erősen kötött elektronok modelljével. Ipari fontosságuk miatt került előtérbe az alumínium, az átmeneti fémek (vas, kobalt, nikkal) és a félvezetők sáv szerkezetének problémája. A rokon tulajdonságú fémek elektron-szerkezetében fellépő közös vonások a számítások segítségével többé-kevésbé már követhetők, és a periódusos rendszeren végigvonuló, empirikusan már jól ismert vagy még csak nem rég felfedezett makroszkopikus vonások sáv szerkezeti magyarázata tudományos igényként merül fel. E szemszögből nézve az alkáli fémek

\* 1967-ben benyújtott kandidátusi értekezés I. része.

\*\* Jelenleg: MTA KFKI, Budapest.



után következő kétvegyértékű, földalkáli fémek vizsgálata aktuális problémává nőtt. A sorozat első két tagjára, a berilliumra és a magnéziumra már végeztek számításokat (Loucks, Cutler 1964; Falicov 1962) és e disszertáció tartalmazza a következő elemek, a kalcium, stroncium és a bárium elektron-szerkezetére vonatkozó vizsgálatokat.

Sajnálatos módon e három fémrel kapcsolatos kísérleti adatok száma meglehetősen kevés, s így a tapasztalati adatokkal való összehasonlításból adódó természetes kontroll lehetősége korlátozott. Az utóbbi 5—10 évben azonban jelentékeny lendületet kaptak a nagy nyomások alatt levő anyagok tulajdonságainak kísérleti vizsgálatai. Szilárd testek esetében ez azt jelenti, hogy a mérhető tulajdonságok a csökkenő rácsparaméter függvényében jelentkeznek. Így például a kalcium, stroncium és bárium fémek elektromos ellenállása növekszik a nyomással, szemben az egyszerű modellek szerint várt, és az ún. „normál” fémek által mutatott ellenálláscsökkenéssel. Mind ez ideig e jelenségre — tudásunk szerint — nem volt kielégítő magyarázat, ami ismét felveti e fémek sávszerkezete megvizsgálásának szükségességét. Számításainkat mindjárt csökkenő rácsparaméterekre is elvégeztük, bízva abban, hogy az elektron-szerkezet részletesebb ismerete magyarázatot ad e fémek ellenállásának a várákozástól eltérő növekedésére. A kalciumra végzett numerikus számításaink a tapasztalattal jó összhangban képesek megmagyarázni az ellenállás növekedésének tényét növekvő nyomás alatt. Minthogy a sávstruktúrák magas nyomáson még nem ismeretesek, azért a stronciumra és báriumra vonatkozó kísérletek kiértékelését nem végeztük el.

A kalciumra vonatkozóan Manning és Krutter (1937) már végeztek számításokat az ún. sejtes („cellular”) módszer egy korábbi változata segítségével. Kvalitatív jellegű eredményeik pontosítására azonban már több oldalról is felhívták a figyelmet (Slater 1956, 39. oldal, Ziman 1960, 115. oldal). A kalcium Fermi felületét Harrison (1963), valamint Altmann és Cracknell (1964) vizsgálták, eredményeik között azonban lényeges eltérés adódott. A stroncium és bárium fémekre tudásunk szerint még egyáltalán nem végeztek energiasáv számításokat. Gombás professzor (1955) a statisztikus atommodell segítségével értelmezi sikerrel a kétvegyértékű fémek egy másik tulajdonságát, a kötési energiát, úgy, hogy közben igen szemléletesen megmutatkozik a kötési energiát szolgáltató különféle energiafajták szerepe.

A számítások módszerül korábban az ortogonálisított síkhullámoknak V. Heine (1957) által kidolgozott és az alumínium, majd később a magnézium és a berillium esetében sikerrel alkalmazott formáját választottuk. A számításokban már jelentős előrehaladást is értünk el, amikor Heinevel folytatott magánbeszélgetések után egy a Heine, Abernkov és Animalu által kidolgozott modellpotenciálra alapozott, lényegében az egyszerű pszeudopotenciális közelítések családjába sorolható, de relative nagy pontosságú módszerre tértünk át. A numerikus munka viszonylag könnyen programozható elektronikus számológépekre, így a számítások megismétlése különböző rácsparaméterekre, különböző fémekre, vagy különböző rácsstruktúrákra csak gépi idő kérdése.

A disszertáció első fejezete, különösen annak első négy alfejezete, mely a szimmetria-viszonyok általános elméletéről ad rövid áttekintést, eredetileg az ortogonálisított síkhullámok módszeréhez lett volna szükséges, a jelenleg alkalmazott módszerrel az itt leírtak egy töredéke is elegendő lett volna. Mégis úgy gondoltuk, érdekes e kérdéssel foglalkozni, egyrészt mivel ez alapja lehet a jelen módszer egy,



a szimmetria-viszonyokat pontosabban figyelembe vevő továbbfejlesztésének, másrészt az itt felsorolt tételek, táblázatok a fémek sávos energiaszerkezetével foglalkozó kutatóknak ilyen részletekig kidolgozottan nem publikált, de lépten-nyomon felhasznált munkaeszközei. A második fejezet tartalmazza a Heine, Aberenkov és Animalu által kifejlesztett leárnýékolt modellpotenciál leírását és annak vizsgálatát a kalcium fém speciális esetében. A harmadik fejezetben foglalkozunk a sávstruktúra számítások ismertetésével és a kapott numerikus eredményekkel. A negyedik fejezetben a kalcium fém Fermi felületének meghatározásáról számolunk be. Az ötödik fejezet a kalcium ellenállásának nyomásfüggését tárgyalja a sávstruktúrára alapozott mikroszkopikus képből kiindulva. A hatodik fejezetben röviden érintünk néhány további kísérleti adatot, mint az elektron-fajhő hőmérsékleti együtthatója, mozgékonyságok, Hall együttható, a lágy röntgen spektrum, stb. Végül a függelékben táblázatokat és néhány olyan részlet matematikai tárgyalását közöljük, melynek a disszertáció szövegében történő elhelyezése véleményünk szerint indokolatlanul megszakította volna, hosszúvá nyújtotta volna a tárgyalást. Mind a 6 fő fejezet elején röviden összefoglaljuk a fejezet tartalmát, főbb eredményeit, így e bevezetőben nem látszik szükségesnek az egyes fejezetekkel bővebben foglalkozni. Itt jegyezzük meg, hogy valamennyi ábrát és táblázatot külön mellékelünk a disszertáció hátsó borítólapjához fűzve, remélhetően ezzel is elősegítve a disszertáció olvashatóságát, könnyebben kezelhetőségét. A szövegben a szerző(k) nevével és a megjelenés évszámával hivatkozunk az irodalmi jegyzékben abc-sorrendben feltüntetett dolgozatokra, könyvekre. Általában atomi egységeket használtunk ( $e = \hbar = m = 1$ ), de az energiát rydbergekben mértük. Ahol e rendszertől eltértünk, ott a szövegben erre utaltunk.

A disszertáció anyagának egy része közös munka gyümölcse. A stronciummal és a báriummal kapcsolatos numerikus munkák programjainak futtatásában Dr. A. O. E. Animalu, a három fém sávstruktúrájára kapott eredmények értékelésében Dr. V. Heine Cambridge-i kutatóknak lényeges szerepe van. A sávstruktúrák leírását (Vasvári, Animalu, Heine 1966), a kalcium ellenállása nyomástól függő viselkedésének magyarázatát (Vasvári, Heine 1967) tartalmazó dolgozatok megjelenés alatt vannak. Megíráásra vár még a kalcium Fermi felületével foglalkozó dolgozat.\*

### 1. A kristályok szimmetriatulajdonságai és ezek néhány egyszerű fizikai következménye

Fizikai rendszerek vizsgálatánál minden esetben előnyt jelent, ha a rendszer rendelkezik valamiféle szimmetriatulajdonsággal. Sokszor csupán e szimmetriatulajdonságok tanulmányozása már lényeges eredményekre vezet a rendszer fizikai sajátságainak a megértésében is. A legegyszerűbben áttekinthetők a legmagasabb fokú szimmetriák, mint például a hidrogén atom gömbszimmetriája, a kétatomos molekulák hengersizimmetriája, melyekből közvetlen következtetések vonhatók le a hullámfüggvények szeparálhatóságára, az energianívók osztályozására. Az egyébként olyan bonyolult fizikai rendszernél is, mint egy szilárd test, nagy előnyt jelent az a tény, hogy a kristály belsejében a „nehezebb” alkotórészek, az ionok (vagy

\* Ezen dolgozatok időközben megjelentek, így az irodalomjegyzékben már e hivatkozások szerepelnek (Szerző).



atomok, vagy molekulák, a kristály fajtájától függően) egy, a kristályra jellemző szabályos rács rácspontjaiban helyezkednek el egyensúlyi helyzetükben. E szabályosságot természetesen sok minden megzavarhatja — ezek közül a fontosabbak a hőmozgás, a kristályok felépülésekor a rácsban keletkező rendellenességek, idegen, szennyező anyagok beépülése stb. —, mégis a legalapvetőbb tulajdonságok értelmezésénél ezektől eltekinthetünk.

A szimmetriatulajdonságok tanulmányozásának pontos és igen hatásos módszere a csoportelmélet. Bár a csoportelmélet szilárdtestfizikai alkalmazásaival több igen jó monográfia foglalkozik, kevés azoknak a száma, amelyben egyaránt megtalálhatók lennének az igényes olvasó által megkövetelt szigorú matematikai alapok és a gyakorlati kutató által keresett közvetlenül alkalmazható képletek, táblázatok. Ezért e fejezetben röviden áttekintést kívánunk nyújtani a kristályrácsok szimmetriájának általános elméletéről és meg akarjuk mutatni, hogyan nyerhetők ebből olyan gyakorlati eljárások, melyeket például a napjainkban sűrűn használt pszeudopotenciál közelítés alkalmaz. E célkitűzésnek megfelelően lényegében *Seitz* (1934, 1936) munkája nyomán áttekintjük a tércsoportok reprezentációinak matematikai elméletét, nem riadva vissza néhány már ismert tétel bizonyításának a modern szilárdtestfizika szemléletét, fogalmait, jelöléseit felhasználó újrafogalmazásától sem. E fejezetek szerény kiegészítésként foghatók fel *Jones* (1960) könyvéhez, mely ugyanilyen indokoktól vezérelve vezeti olvasóit a kristály szimmetriák egzakt matematikai tárgyalásától a konkrét fizikai sajátságokig, megkönnyítve ezzel a modern szilárdtestfizika szimbolizmusát már ismerő kutatónak a 20–30 évvel ezelőtt felismert, de ma is alapvető fontosságú tételek mélyebb megértését. Ugyanakkor azonban csak hivatkozni fogunk a csoportelmélet olyan jól ismert tételeire, melyek megtalálhatók mai, modern monográfiákban is.

### 1.1. A tércsoport

A szimmetriatulajdonságok matematikai leírása végett először tekintsük a minden zavaró rendellenességtől mentes, tökéletes kristályrácsot. Azon geometriai operációk, amelyek e kristályrácsot önmagára képezik le, csoportot alkotnak, melyet a kristály *tércsoportjának* nevezünk, és  $G$ -vel jelöljük. Ezen tércsoport általános eleme a koordinátarendszer  $(x_1, x_2, x_3)$  koordinátájú pontjához azon  $(x'_1, x'_2, x'_3)$  pontot rendeli, melyre nézve

$$x'_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} x_j + t_i \quad (1.1.1)$$

vagy vektor, illetve mátrix jelöléssel

$$\mathbf{x}' = \alpha \mathbf{x} + \mathbf{t} \equiv \{\alpha | \mathbf{t}\} \mathbf{x} \quad (1.1.2)$$

Az (1.1.1), (1.1.2) leképezések egy  $\alpha$  mátrixszal való elforgatást vagy tükrözést, majd egy  $\mathbf{t}$  vektorral való eltolást jelentenek. A csoport egységeleme nyilván az  $\{e | 0\}$  elem, ahol  $e$  az egységmátrix. Könnyen belátható a szorzákszabály is:

$$\{\beta | \mathbf{t}'\} \{\alpha | \mathbf{t}\} = \{\beta \alpha | \beta \mathbf{t} + \mathbf{t}'\} \quad (1.1.3)$$



Mivel az  $\alpha$  elforgatást vagy tükrözést jelent, azért az  $\alpha$  mátrix valós ortogonális mátrix, melynek  $\alpha^{-1}$  inverze létezik. E miatt az  $\{\alpha|\mathbf{t}\}$  elem inverze is létezik:

$$\{\alpha|\mathbf{t}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}|\alpha^{-1}\mathbf{t}\} \quad (1.1.4)$$

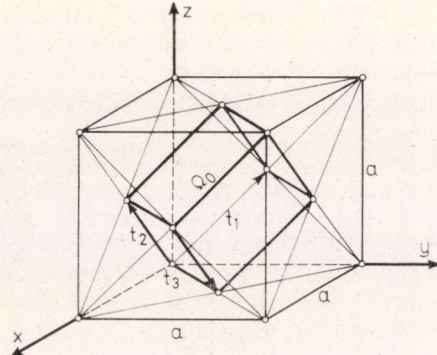
Nyilvánvaló, hogy ezen  $\{\alpha|\mathbf{t}\}$  operátorok forgást leíró részei, az  $\{\alpha|0\}$  operációk is csoportot alkotnak, melyet *pontcsoportnak* nevezünk és  $P$ -vel jelöljük, továbbá a csak eltolást tartalmazó részei, az  $\{\varepsilon|\mathbf{t}\}$  operációk is csoportot alkotnak. Ez utóbbit *transzlációs csoportnak* nevezzük, jele  $T$  lesz. A transzlációs csoport az eredeti csoport egy invariáns alcsoportját alkotja, mivel bármely  $\{\alpha|\mathbf{t}\}$  elem transzformáltja is ilyen alakú:

$$\{\alpha^{-1}|\alpha^{-1}\mathbf{t}\} \{\varepsilon|\mathbf{t}'\} \{\alpha|\mathbf{t}\} = \{\varepsilon|\alpha^{-1}\mathbf{t}'\} \quad (1.1.5)$$

Kimutatható, hogy a  $G/T$  faktorcsoport véges és izomorf  $P$ -vel. A kristályszimmetria további speciális megszorításokat jelent az  $\{\varepsilon|\mathbf{t}\}$  operációkra nézve. Mi most az olyan kristályokkal akarunk foglalkozni, amelyeknél a tércsoport minden  $\mathbf{t}$  transzlációja úgynevezett *primitív transzláció*, azaz a következő alakú:

$$\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\} \equiv \{\varepsilon|n_1\mathbf{t}_1 + n_2\mathbf{t}_2 + n_3\mathbf{t}_3\}, \quad (1.1.6)$$

ahol  $n_1, n_2, n_3$  egész számok és  $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$  három, a kristályrácsra jellemző lineárisan független bázisvektor. A különböző  $(n_1, n_2, n_3)$  számhármassokhoz tartozó  $\mathbf{R}_n$  vektorok alkotják a rácsot. A tércsoport primitív transzlációi tehát a bázisvektorok egész együtthatós lineár-kombinációja-képp állíthatók elő. Az 1.1. és 1.2. ábrákon bemutattuk a lapon centrált köbös (rövidítve fcc) rács és térben centrált köbös (röviden bcc) rács bázisvektorait és az elemi cellákat.



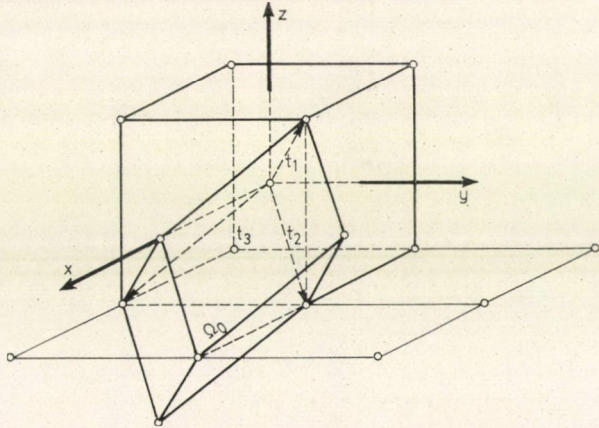
1.1. ábra. A lapon centrált köbös rács  
A bázisvektorok:

$$\mathbf{t}_1 = \frac{a}{2} (0, 1, 1)$$

$$\mathbf{t}_2 = \frac{a}{2} (1, 0, 1)$$

$$\mathbf{t}_3 = \frac{a}{2} (1, 1, 0)$$

$$\text{Az elemi cella: } \Omega_0 = |\mathbf{t}_1(\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3)| = a^3/4$$



1.2. ábra. A térben centrált köbös rács  
A bázisvektorok

$$\mathbf{t}_1 = \frac{a}{2} (1, 1, 1)$$

$$\mathbf{t}_2 = \frac{a}{2} (1, 1, -1)$$

$$\mathbf{t}_3 = \frac{a}{2} (1, -1, -1)$$

$$\text{Az elemi cella } \Omega_0 = |\mathbf{t}_1(\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3)| = a^3/2$$



Abból a tényből, hogy a tércsoport a primitív translációk csoportját mint invariáns alcsoportot tartalmazza, a különféle tércsoportok számos jellemző saját-sága levezethető (Schönfliess, 1923). A részletekbe természetesen nem mehetünk, de érdemes annyit megjegyezni, hogy csoportelméleti módszerekkel tisztázható, hogy mindössze 32-féle pontcsoport lehetséges, melyek mindegyike egy-egy kristály osztálynak felel meg, és 14 fajta primitív translációs csoport létezhet, amelyeket *Bravais-rács* néven ismer a kristályfizika.

A mi szempontunkból most az a lényeges, hogy a kristályrács szimmetriáját leíró tércsoport két alcsoporttal rendelkezik, a primitív translációk invariáns alcsoport-jával, és a pontcsoporttal, amely forgatásokból és tükrözésekből áll.

### 1.2. A tércsoport és két alcsoportja: a pontcsoport és a translációs csoport. A translációs csoport irreducibilis előállításai

Mivel a tércsoport elemeinek hatására a kristályrács önmagára transzformáló-dik, nyilvánvaló, hogy a kristály belsejében mozgó bármely elektron Schrödinger egyenletében, a

$$H\varphi_x \equiv \left( -\frac{1}{2} \Delta + U(\mathbf{r}) \right) \varphi_x = \varepsilon_x \varphi_x \quad (1.2.1)$$

egyenletben az  $U(\mathbf{r})$  potenciálnak a transzformáció végrehajtásakor nem szabad megváltoznia. Más szóval az  $U$  potenciál a kristályrács szerint periodikus potenciál. De akkor az egész  $H$  Hamilton operátor is invariáns, mert a Laplace operátor orto-gonális transzformációkkal és eltolásokkal szemben invariáns. Így tehát a Hamil-ton operátor a tércsoport minden elemével kommutál. Szokás a  $H$  Hamilton operá-tort invariánsul hagyó operációk csoportját a Hamilton operátor, vagy a Schrödinger egyenlet csoportjának nevezni. Most ez a csoport egybeesik a tércsoporttal.

A Hamilton operátor csoportjának vizsgálatával kimutatható (lásd pl. *Hamer-mesh*, 1962, 86, 161. oldal), hogy eltekintve a ritkán előforduló, ún. véletlen („acci-dental”) elfajulásoktól, az operátor különböző  $\varepsilon_x$  sajátértékei a csoport különböző irreducibilis ábrázolásaihoz tartoznak. Más szóval, az  $\varepsilon_x$  energiaértékhez tartozó  $\varphi_x$  sajátfüggvény(ek) terében a  $H$  Hamilton operátor csoportja irreducibilisen ábrá-zolható. Így minden  $\varepsilon_x$  sajátérték azzal jellemezhető, hogy a tércsoport melyik irre-ducibilis előállításához tartozik. *Seitz* (1934) kimutatta, hogy a tércsoport feloldható, és megadott egy általános eljárást feloldható csoportok irreducibilis előállításainak meghatározására (1936). Az eljárás szerint a  $T$  translációs alcsoport irreducibilis előállításai segítségével megkonstruálhatók a teljes  $G$  tércsoport irreducibilis elő-állításai. Első feladatunk tehát a translációs csoport irreducibilis előállításainak megkeresése.

Mint említettük, a  $T$  translációs csoport elemei  $\{e|\mathbf{R}_n\}$  alakúak. A translációk csoportját a Born—Kármán-feltétellel végeessé szokás tenni. Ennek fizikai alapja az, hogy csak véges kiterjedésű, a  $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$  irányokban  $N_1, N_2, N_3$  rácspontot tartal-mazó kristállyal akarunk foglalkozni, hogy elkerüljük a végtelen rács esetében fel-lépő normálási nehézségeket, ugyanakkor azonban el akarunk tekinteni a határ-felület zavaró hatásától, ezért a kristályt sok ilyen nagy kiterjedésű kristálydarabból felépítettnek gondoljuk. Ezt formailag azzal a matematikai megkötéssel fejezhetjük ki, hogy a  $\mathbf{t}_i$  irányban  $N_i$ -t „lépve” ugyanolyan tulajdonságú ponthoz jussunk,



mint ahonnan indultunk, azaz

$$\{\varepsilon|\mathbf{t}_i\}^{N_i} = \{\varepsilon|0\} \quad (i=1, 2, 3) \quad (1.2.2)$$

Ez azt jelenti, hogy a  $T$  csoport három véges ciklikus csoport direkt szorzataképp áll elő, az  $\{\varepsilon|\mathbf{t}_1\}$ ,  $\{\varepsilon|\mathbf{t}_2\}$ ,  $\{\varepsilon|\mathbf{t}_3\}$  elemek hatványaiból és a különböző hatványok szorzataiból. Nyilvánvaló,  $T$  irreducibilis előállításai is a hatványcsoportok irreducibilis előállításainak direkt-szorzatai lesznek. Az  $N_i$ -ed rendű ciklikus csoportnak összesen  $N_i$  darab csupa egydimenziós különböző irreducibilis előállítása van, ezek közül a  $p_i$ -edikben ( $p_i=0, 1, 2, \dots, N_i-1$ ) az  $\{\varepsilon|\mathbf{t}_i n_i\} = \{\varepsilon|\mathbf{t}_i\}^{n_i}$  elemet az

$$\exp\left\{i \frac{2\pi}{N_i} p_i\right\} n_i \quad (1.2.3)$$

sám ábrázolja. Ha a  $\mathbf{t}_i$  rácsvektorok mellett a

$$(\mathbf{t}_i, \mathbf{b}_j) = \delta_{ij} \quad (i, j=1, 2, 3) \quad (1.2.4)$$

definícióval bevezetjük a *reciprok rács*  $\mathbf{b}_i$  bázisvektorait, akkor a translációs csoport általános  $\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\}$  elemének az irreducibilis reprezentációit egyszerű alakban fel tudjuk írni. Mivel

$$\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\} = \{\varepsilon|n_1\mathbf{t}_1 + n_2\mathbf{t}_2 + n_3\mathbf{t}_3\} = \{\varepsilon|n_1\mathbf{t}_1\} \{\varepsilon|n_2\mathbf{t}_2\} \{\varepsilon|n_3\mathbf{t}_3\} \quad (1.2.5)$$

azért az  $\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\}$  elem irreducibilis ábrázolásai az

$$\begin{aligned} & \exp\left\{i \left(\frac{2\pi}{N_1} p_1\right) n_1\right\} \exp\left\{i \left(\frac{2\pi}{N_2} p_2\right) n_2\right\} \exp\left\{i \left(\frac{2\pi}{N_3} p_3\right) n_3\right\} = \\ & = \exp\left\{i 2\pi \left(\frac{p_1}{N_1} n_1 + \frac{p_2}{N_2} n_2 + \frac{p_3}{N_3} n_3\right)\right\} = \exp\{i 2\pi (k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)\} \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

sámok lesznek, ahol

$$k_i = \frac{p_i}{N_i} \quad (p_i=0, 1, 2, \dots, N_i-1) \quad (1.2.7)$$

A teljes translációs csoportnak így  $N=N_1 N_2 N_3$  különböző irreducibilis előállítása van, melyeket a  $(k_1, k_2, k_3)$  számhármass jellemez. Az (1.2.4) definícióból a  $\mathbf{b}_j$  bázisvektorokra kapjuk,

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi \cdot \mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3}{\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi \cdot \mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1}{\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi \cdot \mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3} \quad (1.2.8)$$

Ezzel az  $\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\}$  elemet reprezentáló (1.2.6) szám az

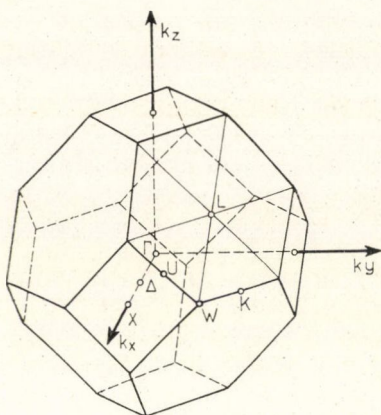
$$\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) \quad (1.2.9)$$

alakba írható, ahol a  $\mathbf{k}$  vektort az ún. *reciprok tér* egy vektorának nevezzük és a következő egyenlettel értelmezzük:

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3 \quad (1.2.10)$$

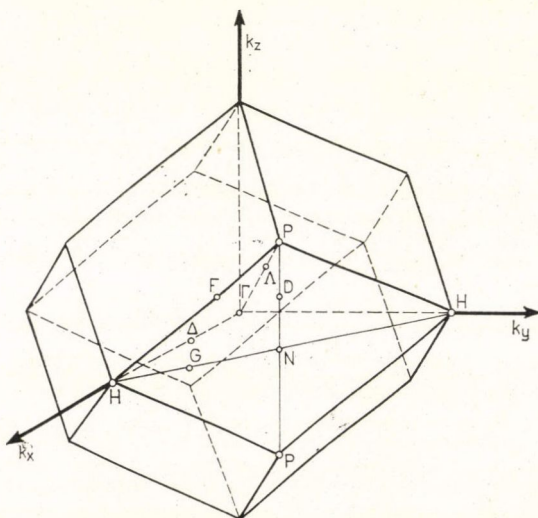
A *reciprok tér*, vagy röviden **k-tér** így a diszkrét, bár igen sűrűn elhelyezkedő  $\mathbf{k}$  pontokból áll. A *reciprok tér* minden egyes  $(k_1, k_2, k_3)$  számhármassal vagyis  $\mathbf{k}$  vek-





1.3. ábra. A lapon centrált köbös (fcc) rács Brillouin zónája és néhány szimmetriapontja

közelebb van az origóhoz, mint bármely más rácspont, a reciprok tér egységcellájának tekintjük és az első Brillouin zónának (továbbiakban röviden: BZ) nevezzük. (Az 1.3. ill. 1.4. ábrákon mutatjuk be a lapon centrált (fcc) ill. a térben centrált (bcc) köbös rács BZ-ját és néhány szimmetriapontját.) Ez az egységcella a  $\mathbf{K}_q$  translációk sorozatával az origóból minden  $\mathbf{K}_q$  rácsvektorba eltolható, és így ezen egységcellákkal az egész reciprok tér egyszeresen lefedhető. Bármely két egységcellában megtalálhatók az egymással ekvivalens  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  pontok, amelyek éppen egy  $\mathbf{K}_q$  rácsvektorban különböznek egymástól. Egy-egy egységcellán belül a  $\mathbf{k}$  vektorok külön-



1.4. ábra. A térben centrált köbös (bcc) rács Brillouin zónája és a szimmetriapontok

torral megadható pontjához a translációs csoportnak egy irreducibilis előállítása tartozik.

Rögtön látható, hogy a  $\mathbf{k}$  vektorral együtt minden

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}_1 \quad (1.2.11)$$

vektorhoz is ugyanaz az (1.2.9) irreducibilis reprezentáció tartozik, ha a  $\mathbf{K}_q$ -vektort a

$$\mathbf{K}_q = q_1 \mathbf{b}_1 + q_2 \mathbf{b}_2 + q_3 \mathbf{b}_3 \quad (1.2.12)$$

egyenlettel definiáljuk, ahol a  $q_1, q_2, q_3$  számok egészek, mivel a  $(\mathbf{K}_1 \mathbf{R}_n)$  belső szorzat  $2\pi$ -nek egész számú többszöröse. A  $\mathbf{K}_q$  vektorok a reciprok térben alkotnak egy rácsot, amelyet reciprok rácsnak nevezünk. Azokat a  $\mathbf{k}$  vektorokat, amelyek egymástól csak a reciprok rács egy rácsvektorában különböznek, ekvivalenseknek fogjuk tekinteni. A reciprok tér origója körül azon tartományt, melyben minden  $\mathbf{k}$  vektor

közelebb van az origóhoz, mint bármely más rácspont, a reciprok tér egységcellájának tekintjük és az első Brillouin zónának (továbbiakban röviden: BZ) nevezzük. (Az 1.3. ill. 1.4. ábrákon mutatjuk be a lapon centrált (fcc) ill. a térben centrált (bcc) köbös rács BZ-ját és néhány szimmetriapontját.) Ez az egységcella a  $\mathbf{K}_q$  translációk sorozatával az origóból minden  $\mathbf{K}_q$  rácsvektorba eltolható, és így ezen egységcellákkal az egész reciprok tér egyszeresen lefedhető. Bármely két egységcellában megtalálhatók az egymással ekvivalens  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  pontok, amelyek éppen egy  $\mathbf{K}_q$  rácsvektorban különböznek egymástól. Egy-egy egységcellán belül a  $\mathbf{k}$  vektorok különbözőek és legfeljebb a határfeleleteken egymással ekvivalens  $\mathbf{k}$  vektorok. A különböző  $\mathbf{k}$  vektorokhoz a translációs csoport egy-egy irreducibilis reprezentációja tartozik, és az egységcella — azaz a BZ — különböző  $\mathbf{k}$  vektorainak száma éppen megegyezik az összes különböző irreducibilis előállítások számával,  $N$ -nel, ami egyébként nyilvánvalóan az eredeti kristályrács összes rácspontjainak számát is jelenti.

Mint említettük, a kristály szimmetriáját leíró tércsoport irreducibilis előállításai a translációs csoport irreducibilis előállításai, így tehát a reciprok tér  $\mathbf{k}$  vektoraival jellemezhetők. Ugyanakkor az (1.2.1) egyenlet  $\varepsilon_x$  ener-



giasajátértékei is a tércsoport különböző irreducibilis előállításaihoz, azaz a BZ különböző  $\mathbf{k}$  vektoraihoz tartoznak. Így ezen  $\varepsilon$  sajátértékek a  $\mathbf{k}$  vektor függvényeinek tekinthetők. Kimutatható, hogy az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  függvény az első BZ-án belül folytonos függvénye a  $\mathbf{k}$ -nak, de általában ugrást szenved a BZ határfelületén (Bouckaert, Smoluchowski, Wigner, 1936).

A teljes tércsoport irreducibilis előállításai azonban nem egyértelműen jellemezhetők translációs alcsoportjának az irreducibilis reprezentációival, azért az  $\varepsilon$  energiaértékeknek a  $\mathbf{k}$  vektorral való jellemzése sem teljes. A translációs csoport különböző irreducibilis előállításaihoz még tartozhatnak a tércsoportnak ugyanazon irreducibilis reprezentációi, és fordítva, azért az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  függvény még lehet egyenlő különböző  $\mathbf{k}$  pontokban, az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  függvény meghatározott szimmetriával rendelkezhet a  $\mathbf{k}$  térben, és egy fix  $\mathbf{k}$  értékhez még tartozhat az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  függvénynek több értéke, melyeknek jellemzésére még egy újabb paraméter lesz szükséges. E viszonyok áttekintéséhez szükséges a tércsoport másik alcsoportjának, a forgásokból, tükrözésekből álló pontcsoportnak a vizsgálata.

Mielőtt azonban erre a kérdésre rátérnénk, érdemes néhány sorban megemlíteni, hogy az előzőeknek a Bloch-tétel már egyszerű folyománya. Az a tény ugyanis, hogy az  $\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\rangle\}$  translációt az  $\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n)$  szám ábrázolja, azt jelenti, hogy ha az  $\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\rangle$  operációt alkalmazzuk a  $\mathbf{k}$ -adik irreducibilis előállításhoz tartozó irreducibilis altér egy  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  hullámfüggvényére, akkor az  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ -nek  $\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n)$ -szeresét kell visszakapnunk:

$$\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = \exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.2.13)$$

De akkor az

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (1.2.14)$$

függvény a rácsvektorok szerint periodikus, tehát

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.2.15)$$

ami éppen Bloch állítása. Itt jegyezzük meg, hogy a  $\mathbf{k}$  vektort hullámszámvektornak is nevezhetjük.

### 1.3. A tércsoport irreducibilis előállításai, a sávok energiaszerkezete

Ebben az alfejezetben megmutatjuk, miként lehet a  $T$  translációs csoport irreducibilis előállításaiából eljutni a teljes  $G$  tércsoport irreducibilis előállításaihoz.

Feltételezhetjük, hogy a  $G$  csoport a négyzetesen integrálható függvények Hilbert terében értelmezve van. Vezessünk be e térben egy olyan bázisrendszert, melynek elemei Bloch-függvények, azaz

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.3.1)$$

E függvényeket használva bázisvektorok gyanánt a  $T$  translációs csoport minden  $\{\varepsilon|\mathbf{R}_n\rangle$  eleme diagonális mátrixszal reprezentálható, a mátrixelemek éppen az  $\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n)$  számok. A  $\mathbf{k}$  vektor,  $T$  irreducibilis előállításainak indexe, a BZ pontjain fut végig.

Induljunk ki e bázisvektorok közül egy tetszés szerintiből, mondjuk az

$$f_1 = e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) \quad (1.3.2)$$

ből. Jelöljük a  $P$  pontcsoport  $\{\alpha_i|0\rangle$  elemét röviden  $\alpha_i$ -vel (ugyanúgy, mint mátrix



reprezentációját a koordinátatérben), a  $T$  translációs csoport tetszés szerinti elemét röviden  $t$ -vel, és  $f_1$ -ből kiindulva képezzük a következő  $h$  darab új függvényt ( $h$  a  $P$  rendszáma):

$$\alpha_1 f_1 = f_1, \quad \alpha_2 f_1 = f_2, \quad \dots, \quad \alpha_h f_1 = f_h \quad (1.3.3)$$

Jelölje továbbá  $\Sigma_h$  az  $f_1, f_2, \dots, f_h$  bázisvektorok által kifeszített alteret a Hilbert térben. A  $\Sigma_h$ -ra vonatkozóan néhány egyszerű tételt bizonyítunk be. (Mint már e fejezet bevezetőjében említettük, e soron következő néhány tétel már ismert az irodalomban (Seitz, 1934, 1936; Bouckaert és mások, 1936; Koster, 1957; stb.), itt csupán a bizonyításoknak egy kismértékű átfoglalalmazása végett foglalkozunk velük).

1. Tétel. A  $\Sigma_h$  a  $G$  tércsoport egy invariáns altere.

Bizonyítás: A  $\Sigma_h$ -ból nem vezetnek ki az  $\alpha_i$  operációk, mert bármely  $f_j \in \Sigma_h$  esetén

$$\alpha_i f_j = \alpha_i \alpha_j f_1 = \alpha_k f_1 = f_k \quad (1.3.5)$$

Nem vezetnek ki  $\Sigma_h$ -ból a  $t$  operációk sem. Ugyanis, mivel  $T$  invariáns alcsoportja  $G$ -nek,

$$t' = \alpha_j^{-1} t \alpha_j \in T, \quad (1.3.6)$$

ezért

$$t f_j = t \alpha_j f_1 = \alpha_j t' f_1 = \alpha_j e^{i \mathbf{k}_1 \mathbf{R}_{t'}} f_1 = e^{i \mathbf{k}_1 \mathbf{R}_{t'}} \alpha_j f_1 = e^{i \mathbf{k}_1 \mathbf{R}_{t'}} f_j \quad (1.3.7)$$

Mínthogy  $G$  általános  $\{\alpha | t\}$  eleme az  $\alpha$  forgatás (tükrözés) és a  $t$  eltolás egymás utáni végrehajtását jelenti, tételünket igazoltuk.

Válasszuk ki a  $\Sigma_h$  térből azokat az  $f_v^1$  ( $v=1, 2, \dots, e$ ) függvényeket, amelyek mind a  $T$  translációs csoport ugyanazon  $A_1$  ábrázolásaihoz, azaz a  $\mathbf{k}$  tér ugyanazon pontjához tartoznak.

2. Tétel: Az  $\alpha_i f_v^1$  elemek ( $v=1, 2, \dots, e$ ;  $\alpha_i$  rögzített eleme  $G$ -nek) kifeszítik a  $T$  egy  $A_2$  ábrázolásának terét.

Bizonyítás: Legyen ismét  $t' = \alpha_i^{-1} t \alpha_i$ . Az  $A_1$  ábrázolás terében érvényes

$$\alpha_i t' f_v^1 = e^{i \mathbf{k}_1 \mathbf{R}_{t'}} \alpha_i f_v^1 \quad (1.3.8)$$

Másrészt

$$\alpha_i t' f_v^1 = t \alpha_i f_v^1 \quad (1.3.9)$$

Az előző egyenlettel egybevetve

$$t \alpha_i f_v^1 = e^{i \mathbf{k}_1 \mathbf{R}_{t'}} \alpha_i f_v^1 \quad (1.3.10)$$

azaz a  $t$ -t most ez esetben az  $\exp i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{t'})$  számokból álló diagonális matrix reprezentálja, az új bázisrendszer  $\alpha_i f_v^1$ .

Ily módon  $\Sigma_h$  a következő  $\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^p$  alterekre bontható:

$$\begin{aligned} \sigma^1 &= f_1^1, f_2^1, \dots, f_e^1, \\ \sigma^2 &= f_1^2, f_2^2, \dots, f_e^2, \\ &\vdots \\ \sigma^k &= f_1^k, f_2^k, \dots, f_e^k, \\ &\vdots \\ \sigma^p &= f_1^p, f_2^p, \dots, f_e^p, \end{aligned} \quad (1.3.11)$$



Itt az egy sorban álló elemek mind a  $T$  egy-egy ábrázolásához, azaz ugyanazon  $k$  ponthoz tartoznak, az egy oszlopban álló elemekre pedig érvényes

$$f_v^i = \alpha_i f_v^1 \quad (1.3.12)$$

3. *Tétel:* Azok az operációk, melyek az egyes  $\sigma^i$ -ket önmagukba viszik át, csoportot alkotnak.

*Bizonyítás:* Jelölje a  $\sigma^i$ -t önmagába transzformáló operációk halmazát  $G^i$ . Nyilvánvaló, hogy az egységelem beletartozik  $G^i$ -be. Továbbá, ha  $\alpha \in G^i$ , akkor a tércsoportok általános tulajdonságai szerint (Seitz, 1936) van olyan  $m$  ( $\geq 1$ ) egész szám, hogy

$$\alpha^m = t \quad (1.3.13)$$

Ebből

$$\alpha^{-1} = \alpha^{m-1} t^{-1} \quad (1.3.14)$$

Alkalmazzuk  $\alpha^{-1}$ -et  $\sigma^i$  egy tetszés szerinti  $f_v^i$  elemére:

$$\alpha^{-1} f_v^i = \alpha^{m-1} t^{-1} f_v^i = \alpha^{m-1} e^{ik_i R t^{-1}} f_v^i = e^{ik_i R t^{-1}} \alpha \cdot \alpha \dots \alpha^{m-1} f_v^i \quad (1.3.15)$$

Mivel  $\alpha f_v^i \in \sigma^i$  és  $\alpha$ -t akárhányszor alkalmazva  $\sigma^i$ -beli elemre nem jutunk ki belőle, azért (1.3.15) bizonyítja, hogy  $\alpha^{-1}$  sem visz ki  $\sigma^i$ -ből, tehát  $\alpha$ -val  $\alpha^{-1}$  is eleme  $G^i$ -nek. Ezzel igazoltuk, hogy a  $G^i$  halmaz csoport.

4. *Tétel:* A  $G^i$  csoportok ( $i=1, 2, \dots, p$ ) izomorfok.

*Bizonyítás:* Legyen  $\alpha \in G^i$ , ez akkor azt jelenti, hogy

$$\alpha f_v^i = f_\mu^i \quad (1.3.16)$$

A  $\sigma^i$  alterek definíciója révén, azaz (1.3.12)-t felhasználva:

$$f_v^i = \alpha_i \alpha_j^{-1} f_v^j \quad (1.3.17)$$

$$f_\mu^i = \alpha_i \alpha_j^{-1} f_\mu^j$$

behelyettesítve ezeket (1.3.16)-ba

$$\alpha \alpha_i \alpha_j^{-1} f_v^j = \alpha_i \alpha_j^{-1} f_\mu^j \quad (1.3.18)$$

azaz

$$\alpha_j \alpha_i^{-1} \alpha \alpha_i \alpha_j^{-1} f_v^j = f_\mu^j \quad (1.3.19)$$

De akkor ez azt jelenti, hogy minden  $\alpha \in G^i$ -hez megadható egy

$$\beta = \alpha_j \alpha_i^{-1} \alpha \alpha_i \alpha_j^{-1} \in G^j \quad (1.3.20)$$

azaz a  $G$  csoport  $\alpha_i \alpha_j^{-1}$  elemével a  $G^i$  csoport elemei a  $G^j$  csoport elemeire transzformálhatók, amivel az állítást igazoltuk.

*Definíció:* A  $G^i$  csoportot a  $k$  hullámszámvektor csoportjának nevezzük.

5. *Tétel:* Ha az egyes  $\sigma^i$  altereket teljesen kiredukáljuk olyan  $\sigma_j^i$  ( $j=1, 2, \dots, q$ ) alterekre, melyek a  $G^i$  csoportok számára irreducibilisek, akkor minden olyan  $\alpha_s$  operációra, amely eleme a  $G$  pontcsoportnak, de nem eleme a  $G^i$  alcsoportnak, a  $\sigma_j^i$  irreducibilis altér átmegegy egy  $G^r$  csoport irreducibilis alterébe,  $\sigma_j^r$ -be.



*Bizonyítás:* Legyen  $\beta_n \in G^i$  és  $\alpha_i$  az az eleme  $P$ -nek, amely generálta  $\sigma^i$ -t a  $\sigma^1$ -ből, azaz, melyre  $\alpha_i f_v^1 = f_v^i$  volt. Nyilván az  $\alpha_s$  és  $\alpha_i$  operátorokra található olyan  $\alpha_r$ , hogy  $\alpha_s = \alpha_r \alpha_i^{-1}$  legyen. Vegyünk fel  $\sigma_j^i$ -ben egy bázisrendszert az  $f_{j,\mu}^i$  bázisvektorokkal, ekkor

$$\beta_n f_{j,\mu}^i = \sum_v b_{n,\mu v} f_{j,v}^i \quad (1.3.21)$$

ahol a  $b_{n,\mu v}$  matrix a  $\beta_n$  elemet reprezentálja  $\sigma_j^i$ -ben. Érvényes

$$\alpha_s \beta_n \alpha_s^{-1} \alpha_s f_{j,\mu}^i = \alpha_r \alpha_i^{-1} \beta_n \alpha_i \alpha_r^{-1} \alpha_r \alpha_i^{-1} f_{j,\mu}^i = \alpha_r \alpha_i^{-1} \beta_n \alpha_i \alpha_r^{-1} f_{j,\mu}^i = \beta_r f_{j,\mu}^i \quad (1.3.22)$$

Az  $\alpha_i$  elemekkel a  $\beta_n (\in G^i)$ -t először visszatranszformáltuk  $G^1$ -be, majd onnan az  $\alpha_r$ -ekkel egy  $G^r$ -be. Így  $\beta_r = \alpha_r \alpha_i^{-1} \beta_n \alpha_i \alpha_r^{-1} \in G^r$ . Másrészt (1.3.21)-re közvetlenül alkalmazva az  $\alpha_s$ -et

$$\alpha_s \beta_n f_{j,\mu}^i = \sum_v b_{n,\mu v} \alpha_s f_{j,v}^i = \sum_v b_{n,\mu v} f_{j,v}^r \quad (1.3.23)$$

(1.3.22) és (1.3.23) összevetéséből

$$\beta_r f_{j,\mu}^r = \sum_v b_{n,\mu v} f_{j,v}^r \quad (1.3.24)$$

azaz a  $\beta_r$  elemeket a  $\sigma_j^r$ -ben ugyanaz a  $b_{n,\mu v}$  irreducibilis matrixrendszer reprezentálja, mint  $\beta_n$ -eket a  $\sigma_j^i$ -ben. Ezzel a tétel igazolást nyert.

Gyűjtsük össze mármost a  $\sigma_j^i$  ( $j=1, 2, \dots, q$ ) alterek közül azokat, melyek a  $G^i$  csoport ugyanazon, mondjuk  $l$ -edik irreducibilis előállításaihoz tartoznak, jelöljük ezek egyesítéséből előálló teret  $\sum^{k\dots m}$ -mel

$$\sum^{k\dots m}: \sigma_k^1 \dots \sigma_m^1; \sigma_k^2 \dots \sigma_m^2; \dots; \sigma_k^p \dots \sigma_m^p \quad (1.3.25)$$

Az egyes aláhúzott terekben a  $G$  pontcsoport ekvivalens  $G^i$  ( $i=1, 2, \dots, p$ ) alcsoportjai egyforma módon (ugyanazon mátrixokkal) vannak reprezentálva.

A  $\sum^{k\dots m}$ -ben az egész tércsoport ábrázolva van, mert, ha egy  $\alpha \in G^i$ , akkor ez valamelyik aláhúzott altérben van ábrázolva, ha pedig  $\alpha \in G$ , de  $\alpha \notin G^i$ , akkor az egyik aláhúzott térből egy másikba transzformál, tehát  $\sum^{k\dots m}$ -ben ábrázolva van.

**6. Tétel:** Ha az egyes  $\sigma^i$  alterekben a  $G^i$  alcsoport  $l$ -edik irreducibilis előállítása csak egyszer fordul elő (az aláhúzott alterek között csak egy-egy altér van), akkor ezek egyesített tere a

$$\sum^m: \sigma_k^1, \sigma_k^2, \dots, \sigma_k^p \quad (1.3.26)$$

ha többször fordul elő, akkor pedig

$$\begin{aligned} &\sum^k: \sigma_k^1, \sigma_k^2, \dots, \sigma_k^p, \\ &\vdots \\ &\sum^m: \sigma_m^1, \sigma_m^2, \dots, \sigma_m^p \end{aligned} \quad (1.3.27)$$

terek külön-külön is a teljes  $G$  pontcsoport egy irreducibilis alterét alkotják.

*Bizonyítás:* Az állítás igazolásához elegendő annyit kimutatni, hogy pl. az (1.3.27)-beli  $\sum^k$  irreducibilis  $G$ -re nézve. Hogy az altérből  $G$  elemei nem vezetnek ki, azt  $\sum^k$  konstrukciója és az 5. tétel biztosítja. Ha  $\sum^k$  nem lenne irreducibilis altere  $G$ -nek, akkor felbomlana legalább két invariáns altérre  $\sum_1^k$  és  $\sum_2^k$ -re. Legyen



$f_v^i$  egy eleme  $\sum_1^k$ -nek,  $f_\mu^j$  eleme  $\sum_2^k$ -nek, továbbá  $\beta$  az az eleme  $G^1$ -nek, mely  $f_\mu^1$ -t  $f_v^1$ -be viszi, azaz  $\beta f_\mu^1 = f_v^1$ . Nyilvánvaló, hogy

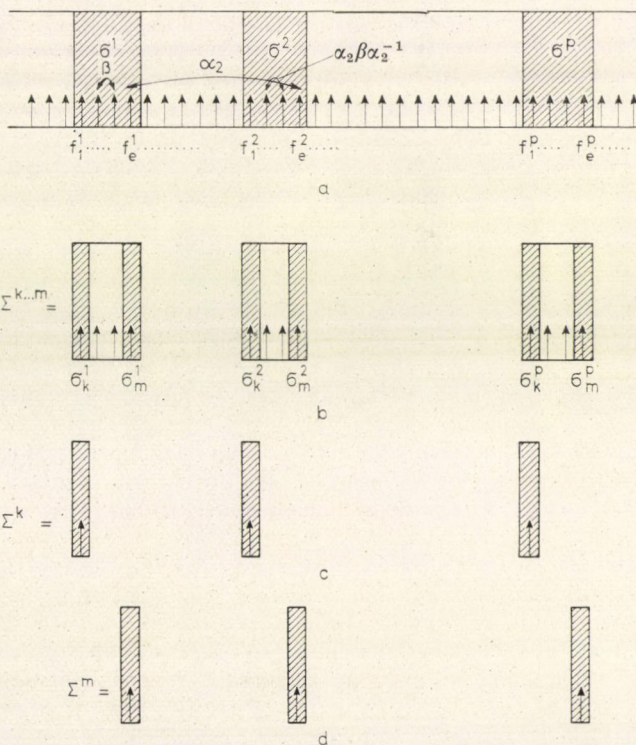
$$\alpha_i \beta \alpha_j^{-1} f_\mu^j = f_v^i \quad (1.3.28)$$

azaz az  $\alpha = \alpha_i \beta \alpha_j^{-1}$  elem  $\sum_2^k$ -ből  $\sum_1^k$ -be visz át, azaz  $\sum_2^k$  ellentétben konstrukciójával és az 5. tétellel nem lehet invariáns  $G$ -re nézve.

Ily módon bebizonyítottuk, hogy a teljes  $G$  tércsoport irreducibilis ábrázolásait teljes mértékben jellemzik a translációs csoport irreducibilis ábrázolásai — azaz a  $\mathbf{k}$  tér vektorai —, valamint e  $\mathbf{k}$  vektor csoportjának, mely szintén egy pontcsoport az irreducibilis ábrázolásai. Ez akkor azt jelenti, hogy ha kristálybeli elektronok energiáit osztályozni akarjuk, akkor először azt kell megmondani, hogy a szóban forgó energiaérték melyik  $\mathbf{k}$  vektorhoz tartozik, majd azt, hogy a  $\mathbf{k}$  vektor csoportjának melyik irreducibilis előállításához. Így például a  $W_3$  jelölés jelenti egyrészt a BZ  $W$ -pontját ( $k = (2\pi/a)(1, 1/2, 0)$ ) másrészt a  $W$  pont csoportjának 3-as indexű irreducibilis ábrázolását.

A  $\mathbf{k}$  pont választásától függően két esetet kell megkülönböztetnünk. Ha a  $\mathbf{k}$  általános helyzetű, akkor csoportja, melyet továbbiakban  $G(\mathbf{k})$ -val jelölünk, csak az egységelemet tartalmazza, azaz az egyes  $\sigma^i$  terek egydimenziósak, és egyben irreducibilisek is. Így egyesítésük, a  $\sum$  tér annyi dimenziós, ahány eleme van a pontcsoportnak, és ez egyben az  $\varepsilon$  energiaérték degenerációjának a fokát is jelenti. Ezt a degenerációt a kristályrács periodicitása nem oldja fel. Ha a  $\mathbf{k}$  vektor változik a BZ belsejében, de csak általános helyzetű  $\mathbf{k}$  pontokon át, akkor a megfelelő  $\varepsilon(\mathbf{k})$  energiaértékek alkotják a folytonos  $\varepsilon(\mathbf{k})$  görbét, az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  sávot.

Ha a  $\mathbf{k}$  pont speciális helyzetű, pl. valamelyik szimmetriasíkra vagy egyenesre esik, akkor csoportja az egységelemen kívül más elemeket is tartalmazhat, az egyes  $\sigma^i$  alterek többdimenziósak. Ezen alterek a  $G(\mathbf{k})$ -ra nézve irreducibilis alterekre bontandók, amelyek lehetnek egy- vagy többdimenziósak. Ezen irreducibilis altereknek megfelelően történik meg a speciális helyzetű  $\mathbf{k}$  pontban az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  energianívok



1.5. ábra. A tércsoportok irreducibilis altereinek szemléltetése



felhasadása a kristályszimmetria hatására. A felhasadás azonban nem lesz teljes, mert a 2- vagy többdimenziós irreducibilis alterekhez tartozó energiaértékek 2- vagy többszörösen degeneráltak maradnak, mely degeneráció alapvető, és nem szüntethető meg semmiféle potenciállal, feltéve, hogy ez mutatja a kristály szimmetriáját. (A spin-pálya kölcsönhatás módosítja ezt a felhasadást — mint általában —, de ezt most nem vesszük figyelembe.) A speciális helyzetű pontról azonban közvetlenül átmehetünk a szomszédos általános (vagy kisebb szimmetriájú) pontra, ahol a felhasadás már megtörténik (legalább részben). Az általános helyzetű  $\mathbf{k}$  pontokhoz tartozó különböző energiasávok a speciális helyzetű  $\mathbf{k}$  pontokban összekapcsolódhatnak a kristályszimmetria következményeképp.

Összefoglalásképpen az 1.5. ábrák segítségével megkíséreljük szemléletesen megfogalmazni azt az eljárást, ahogy a  $G$  tércsoport irreducibilis előállításai, azaz egy elektron kristálybeli  $\varepsilon$  energianívói a szimmetriatulajdonságok segítségével jellemezhetők.

Először is az elektron  $\psi$  hullámfüggvényeinek Hilbert terében  $f_{\mathbf{k}}$  Bloch függvényeket vezetünk be bázisvektorok gyanánt. Az 1.3. a) ábrán a két vízszintes vonal közötti sáv sematizálja a teljes Hilbert teret, alul a kis nyilak az  $f_{\mathbf{k}}$  bázisvektorokat. A függőleges, besatírozott sávok jelentik azt a  $\sum$  alterét a Hilbert térnek, melynek bázisvektorai egy fix  $\mathbf{k}_1$  vektorhoz tartozó  $f_{\mathbf{k}_1}$  függvényből úgy jönnek létre, hogy alkalmazzuk rájuk a  $P$  pontcsoport elemeit, azaz a  $\mathbf{k}_1$  vektort a kristályszimmetria által megengedett mindenféle forgatásnak és tükrözésnek alávetjük. Egy-egy függőleges  $\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^p$  sávon (altéren) belül található az azon  $f$  bázisvektorok, amelyek azonos  $\mathbf{k}$  vektorhoz tartoznak. Azok a  $\beta$  operációk, amelyek egy-egy sáv elemeit önmagukba viszik át, alkotják a hullámszámvektor  $G(\mathbf{k})$  csoportját, és a  $P$  pontcsoport  $G(\mathbf{k})$ -n kívüli  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p$  elemeivel lehet a  $\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^p$  altereket egymásba áttranszformálni. Az egyes  $\sigma^i$  alterekben a  $\mathbf{k}$  vektor csoportja általában reducibilisen ábrázolható. Bontsuk fel ezeket a  $G(\mathbf{k})$ -ra nézve irreducibilis alterekre. Ezt mutatja az 1.3. b) ábra. Tételezzük fel, hogy az egyes  $\sigma^i$  alterek szélső  $\sigma_k^i \sigma_m^i$  bevonalazott alterei a  $G(\mathbf{k})$  csoport ugyanazon irreducibilis előállításához tartoznak. A nem vonalazott rész tartozhat egy (vagy több) további irreducibilis alterhez (vagy alterekhez). Az 1.3. c) ábra mutatja a  $\sigma_k^i$  alterek egyesítéséből előálló  $\sum^k$  altért, amely már a teljes  $G$  pontcsoport irreducibilis altere, ugyanúgy az 1.3. d) ábra egy másik, de a  $G$  ugyanazon irreducibilis ábrázolásához tartozó  $\sum^m$  alterét szemlélteti. Ezen  $\sum^k, \dots, \sum^m$  altereket most is Bloch-függvények feszítik ki, melyek ugyan különböző  $\mathbf{k}$  vektorokhoz tartozhatnak, de a megfelelő energiaértékek ugyanazok lesznek, mivel valamennyi Bloch-függvény a teljes  $G$  tércsoport ugyanazon irreducibilis előállításához tartozik. Az a tény, hogy ugyanazon energiaérték több  $\mathbf{k}$  vektorhoz is tartozik, azt fejezi ki, hogy az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  függvény szimmetrikus függvény, hiszen a különböző  $\mathbf{k}$ -vektorok mind a  $P$  pontcsoport elemeinek, azaz forgatásoknak, tükrözéseknek hatására jöttek létre. Az is látható, hogy az energiaértékek jellemzésére előbb meg kell adni a kiinduló  $\mathbf{k}$  vektort, majd a  $\mathbf{k}$  vektor csoportjának, a  $G(\mathbf{k})$ -nek irreducibilis előállításait, amelyek megszabják a teljes tércsoport irreducibilis előállításait. Hangsúlyoznunk kell, hogy a pontcsoportoknak, így a hullámszámvektor  $G(\mathbf{k})$  csoportjának is az irreducibilis előállításai jól ismertek, így ezekkel az egyes  $\sigma^i$  altereknek a „kiredukálása” bár hosszadalmas, de elvi nehézség nélkül elvégezhető feladat.



#### 1.4. Szimmetrizált hullámfüggvények a BZ szimmetriapontjaiban

Gyakorlatilag nincsen szükségünk a  $G$  tércsoport összes különböző irreducibilis altéréinek teljes meghatározására. A keresett  $\varepsilon$  elektron-energianívok ugyanis az (1.2.1)-beli  $H$  Hamilton operátor sajátértékei. E sajátértékek meghatározására elindulhatunk úgy, hogy az elektron  $\psi$  állapotfüggvényét sorbafejtjük egy bázis-rendszer szerint a hullámfüggvények lineáris vektorterében. E bázisfüggvények gyanánt célszerű mindjárt a Bloch-függvényeket választani:

$$\psi = \sum_{k_i} c_{k_i} f_{k_i} \quad (1.4.1)$$

E reprezentációban az energianívók a

$$H_{ij} = \langle f_{k_i} | H | f_{k_j} \rangle \quad (1.4.2)$$

energia-mátrix sajátértékei lesznek. A rendszer szimmetriaviszonyai következtében azonban ezen mátrix nagyfokú egyszerűsítésére nyílik lehetőség. Csoportelméleti módszerekkel könnyen belátható, hogy a  $H_{ij}$  mátrixelemek azonosan eltűnnek, ha az  $f_{k_i}$  és  $f_{k_j}$  függvények a  $G$  tércsoport különböző irreducibilis előállításához tartoznak. Érvényes továbbá, hogy a teljes  $H_{ij}$  energiamátrix négyzetes blokkokra bomlik:

$$H_{ij} = \begin{pmatrix} H^1 & & \\ & H^2 & \\ & & \ddots \\ & & & H^r \end{pmatrix} \quad (1.4.3)$$

ahol az egyes  $H^1, H^2, \dots, H^r$  mátrixok elemei a  $G$  tércsoport *ugyanazon* irreducibilis előállítása szerint transzformálódó függvények között veendők. A teljes  $H_{ij}$  energia-sajátértékeit nyilván az egyes  $H^1, H^2, \dots, H^r$  blokkok sajátértékei szolgáltatják, ami ismét mutatja az irreducibilis előállítások és az energianívók kapcsolatát. Így ha egy meghatározott irreducibilis előállításhoz tartozó energiaértéket keresünk, akkor elegendő azon blokk sajátértékeit megkeresni, amely blokk mátrixelemeit pontosan a szóban forgó irreducibilis ábrázoláshoz tartozó függvényekkel számítottuk. Legyen ez a blokk most mondjuk a  $H^v$ .

További fontos egyszerűsítésre ad lehetőséget az a tény, hogy a  $H^v$  mátrixelemei nem függenek attól, hogy a  $v$ -dik irreducibilis előállításhoz tartozó egy irreducibilis altér bázisvektorai közül *melyikkel* képeztük őket. Ezt úgy értjük, hogy ha például a  $v$ -dik irreducibilis altér az előző fejezetbeli  $\sum^k, \dots, \sum^m$  altérek, és ezen altérek száma, azaz a  $v$ -dik irreducibilis ábrázolás előfordulásainak száma  $c_v$ , akkor a  $H^v$  egy  $c_v \times c_v$ -szeres mátrix,

$$H_{ij}^v = \langle f_i^v | H | f_j^v \rangle, \quad (i, j = 1, 2, \dots, c_v) \quad (1.4.4)$$

és  $f_i^v$  a  $\sum^k, \dots, \sum^m$  terek közül az  $i$ -ediknek, a  $f_j^v$  pedig a  $j$ -ediknek tetszés szerinti vektora. Ha például a  $v$ -edik irreducibilis előállítás csak egyszer fordulna elő, akkor a  $H^v$ -blokk egyetlen elemből állna, függetlenül attól, hogy a  $\sum^k$  hány dimenziós.

Az előny most már onnan származik, hogy nem kell a  $\sum^k, \dots, \sum^m$  altérek valamennyi bázisvektorát megkeresni, elegendő mindegyikből csak egy-egy vektort találni, és máris előállnak azok az  $f_i^v$  függvények, amelyekkel a  $H_{ij}^v$  mátrixelemeket



képezni kell. Elegendő például a  $\Sigma^k, \dots, \Sigma^m$ -beli vektorok helyett a szűkebb  $\sigma_k^1, \dots, \sigma_m^1$  terekből keresni az alkalmas  $f_i^v$ -ket, amelyek pedig nem egyebek, mint a  $\mathbf{k}$  hullámszámvektor csoportjának irreducibilis alterei a kiszemelt  $\mathbf{k}$  vektorral ekvivalens hullámszámvektorú Bloch-függvények  $\sigma^1$  terében.

A gyakorlati „recept” tehát az energiasajátértékek megkeresésére a következő.

1. Megválasztjuk az  $f_k$  Bloch-függvények konkrét alakját. Egyszerű esetben ezek lehetnek síkhullámok.
2. Rögzítünk egy  $\mathbf{k}$  vektort és tekintjük azt a  $\sigma^1$  teret, amelynek bázisvektorai a  $\mathbf{k}$ -val ekvivalens hullámszámvektorral rendelkező Bloch-függvények. Ez azt jelenti, hogy tekintjük a  $\mathbf{k} + \mathbf{K}$  alakú hullámszámvektorokat — ill. a hozzájuk tartozó Bloch-függvényeket, ahol  $\mathbf{K}$  a reciprok tér rácsvektorain (gyakorlatilag az origó egy véges környezetén) fut végig.
3. A  $\sigma^1$  teret a  $\mathbf{k}$ -vektor  $G(\mathbf{k})$  csoportjára nézve irreducibilis alterekre bontjuk.
4. Összegyűjtjük az azonos, mondjuk a  $v$ -dik irreducibilis előállítás szerint transzformálódó altereket és mindegyikből kiválasztunk egy-egy  $f_1^v, f_2^v, \dots, f_{c_v}^v$  függvényt.
5. Ezen függvényekből megalkotjuk az (1.4.4) energiamátrixot, mely így a  $\mathbf{k}$  ponthoz tartozik, és megoldjuk a

$$\det |H_{ij}^v(\mathbf{k}) - \varepsilon^v(\mathbf{k})\delta_{ij}| = 0 \quad (1.4.5)$$

szekuláris egyenletet. Az  $\varepsilon^v(\mathbf{k})$  gyökök adják a  $\mathbf{k}$ -pontban a  $v$ -dik irreducibilis előállításhoz tartozó energiaértékeket. A különböző gyökök különböző sávokba fognak tartozni.

6. Az eljárást megismétljük valamennyi, a  $\sigma^i$ -ben előforduló irreducibilis altérre, és a BZ annyi  $\mathbf{k}$  pontjára, ahányban a számításokat el akarjuk végezni.

Ez az eljárás a  $H$  Hamilton operátor és az  $f_k$  Bloch-függvények ismeretében alkalmas arra, hogy „feltérképezze” a BZ-t, azaz előállítsa az  $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$  energiafüggvényt, amely a szilárd testek sávos szerkezetét és ezen át szinte valamennyi fizikai tulajdonságát meghatározza.

Még szólnunk kell néhány szót a 3., 4. lépésről, amely tulajdonképpen a  $\sigma^1$  függvényternek (bázisai a  $\mathbf{k}$ -val ekvivalens  $\mathbf{k}'$ -jú Bloch-függvények) a  $G(\mathbf{k})$  pontcsoport szerinti kiredukálása, ill. egy-egy reprezentáns  $f$ -függvény megkeresése. A szilárdtest fizikában fellépő  $G(\mathbf{k})$  pontcsoportok mind véges, ismert tulajdonságú csoportok, melyek szerinti kiredukálás a csoportelmélet standard, itt nem részletezendő módszereivel elvégezhető. Legegyszerűbb talán Schlosser (1962) módszere, aki tulajdonképpen olyan projekciós operátorokat ad meg, amelyek egy tetszés szerinti  $f_{k_1}$  Bloch-függvénynek megadják mindjárt a  $v$ -dik irreducibilis altérbe eső vetületét, azaz egy kívánt  $f_i^v$  függvényt. Az  $A$  függelékben megadjuk a lapon centrált köbös kristályrács teljes analizisét, azaz a BZ valamennyi számításba jövő pontjában az összes irreducibilis előállításhoz tartozó függvényeket.

### 1.5. A szabad-elektron közelítés

Mint már előző fejezetünkben említettük, a

$$H_{ij}^v = \langle f_i^v | H | f_j^v \rangle \quad (1.5.1)$$

$$\det |H_{ij}^v - \varepsilon^v \delta_{ij}| = 0 \quad (1.5.2)$$



egyenletek segítségével az  $\varepsilon^v$  energianívok kiszámíthatók a BZ bármely  $\mathbf{k}$  pontjában, feltéve, hogy megadtuk azokat az  $f_{\mathbf{k}}$  Bloch-függvényeket, amelyekből az  $f_i^v$  szimmetrikus kombinációk az  $A$  függelékben megadott eljárással előállíthatók, valamint ismerjük a kristályrács elektronjainak  $H$  Hamilton operátorát. Az előző fejezetbeli szimmetriatulajdonságok illusztrálására most azt az egyszerű esetet fogjuk megvizsgálni, amikor az  $f_{\mathbf{k}}$  Bloch-függvények egyszerű síkhullámok a  $\mathbf{k}$  hullámszámvektorral, és a  $H$  Hamilton operátor csak a kinetikus energiának megfelelő operátort tartalmazza, azaz a  $V(\mathbf{r})$  potenciális energiát zérusnak választjuk. Ez a szabadelektron közelítés fizikailag is sok esetben igen jó közelítést jelent és nagyon szemléletes összehasonlítási alapot jelent arra az esetre, ha a  $V(\mathbf{r})$  potenciál már nem zérus. Kiindulásnak tehát most

$$f_{\mathbf{k}\mu} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mu\mathbf{r}} \quad (1.5.3)$$

és

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 \quad (\text{atomi egységben}) \quad (1.5.4)$$

ahol  $V$  a kristály teljes térfogata. Síkhullámok ortogonalitása miatt nyilvánvaló, hogy — az  $A$  függelék jelöléseivel

$$H_{ij}^v = \frac{1}{2} \frac{\sum_{\mu\mu'} g_{i\mu}^v g_{j\mu'}^v k_{v_i}^2 \delta_{\mu\mu'} \delta_{ij}}{[\sum_{\mu} (g_{i\mu}^v)^2]^{1/2} [\sum_{\mu'} (g_{j\mu'}^v)^2]^{1/2}} \quad (1.5.5)$$

ahol  $\mathbf{k}_{v_i}$  a  $\mathbf{k}_{\mu}$  (vagy  $\mathbf{k}_{\mu'}$ ) vektorok akármelyikét jelentheti. Egyszerűen választható például az  $A$  függelék  $I$  jelű táblázataiból az  $i$ -edik oszlopban található reprezentáns  $\mathbf{k}_{\mu}$ -vektor. Energiamátrixunk most diagonális, így sajátértékei egyszerűen:

$$\varepsilon_i^v = \frac{1}{2} k_{v_i}^2 \quad (\text{atomi egységben}) \quad (1.5.6)$$

Mivel a  $V(\mathbf{r})$  potenciál zérus, azért a különböző  $v$  irreducibilis előállításokhoz tartozó  $\varepsilon_i^v$  energianívok degenerációja nem szükségszerűen oldódik fel, ami abban is megnyilvánul, hogy  $\varepsilon_i^v$  csak a  $\mathbf{k}_{v_i}$  vektorok hosszától függ, így az azonos nagyságú  $\mathbf{k}_{v_i}$  vektorokkal jellemzett állapotok energiái egybeesnek, még ha különböző irreducibilis előállításokhoz tartoznak is. A  $\mathbf{k}_{v_i}$  vektorok mindig felírhatók

$$\mathbf{k}_{v_i} = \mathbf{k} + \mathbf{K}_{v_i} \quad (1.5.7)$$

alakban, ahol  $\mathbf{k}$  a BZ-nek az a pontja, amelyben az  $\varepsilon$  energiaértékeket keressük és  $\mathbf{K}_{v_i}$  a reciprok rács egy vektora. (Más szóval: a  $\mathbf{k}_{v_i}$  vektor mindig a  $\mathbf{k}$ -vel ekvivalens vektor, ami természetes is az előző fejezetbeli  $\sigma^1$  altér konstrukciója folytán.) Legyen továbbá

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a} (\xi, \eta, \zeta)$$

$$\mathbf{K}_{v_i} = \frac{2\pi}{a} (n_1, n_2, n_3) \quad (1.5.8)$$



ahol az  $n_1, n_2, n_3$  számok alkalmas egészek, s így

$$\varepsilon_i^v = \frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 \{ (\zeta + n_1)^2 + (\eta + n_2)^2 + (\zeta + n_3)^2 \} \quad (1.5.9)$$

vagy még egyszerűbben, olyan egységeket használva, melyben  $\frac{1}{2}(2\pi/a)^2 = 1$

$$\varepsilon_i^v = (\zeta + n_1)^2 + (\eta + n_2)^2 + (\zeta + n_3)^2 \quad (1.5.10)$$

Fölösleges lenne az igen egyszerű számítások részletes ismertetése, legyen szabad az eljárást egyetlen példával illusztrálni. Szemeljük ki a fcc rácsot, valamint a BZ  $\Gamma$  és  $X$  pontját összekötő szimmetriaegyenes egy  $\Delta$  pontját (lásd 1.4. ábrát). Ekkor  $\eta = \zeta = 0$ , és

$$\varepsilon_i^v = (\zeta + n_1)^2 + (n_2^2 + n_3^2), \quad (0 \leq \zeta \leq 1) \quad (1.5.11)$$

A „ $\Delta$ -tengely  $\mathbf{k} = (m, 0, 0)$ ,  $0 < m < 1$ ” című  $\Delta$ -jelű táblázatából leolvasható, hogy ha  $i=1$  (1-es oszlop) és  $v=\Delta_1$  akkor  $n_1=n_2=n_3=0$ , és (a táblázatbeli  $m$  helyett most  $\zeta$  jelölést használva)

$$\varepsilon_{11}^{A_1} = \zeta^2 \quad (1.5.12)$$

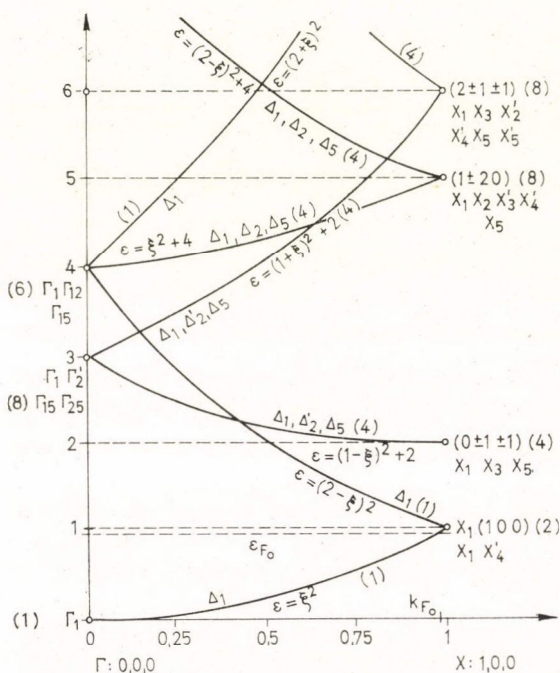
az energiasáv egyszerű parabola. Ha  $i=2$  (2-es oszlop) akkor,  $n_1 = -1$  és  $n_2 = n_3 = 1$

$$\varepsilon_{21}^{A_1} = (1 - \zeta)^2 + 2 \quad (1.5.13)$$

Ez a görbe azonban az  $ijj$  típusú pontokhoz tartozik, ami a II  $\Delta_{ijj}$ -jelű táblázat szerint egy négydimenziós altér egyik pontja, így az egydimenziós  $\Delta_1$  irreducibilis előállítás mellett még ugyanezen tér tartalmazza a  $\Delta'_2$  és  $\Delta'_5$  irreducibilis előállításokat is, ez utóbbi kétdimenziós. A szabad-elektron közelítésben ezek a nívók nem hasadnak fel, s így most

$$\varepsilon^{A_1} = \varepsilon^{A_2} = \varepsilon^{A_5} = (1 - \zeta)^2 + 2 \quad (1.5.14)$$

a teljes  $\Delta$  egyenes mentén. Bekapcsolva a  $V(\mathbf{r})$  potenciált, ezen energiagörbék természetesen szétválnak, a degeneráció feloldódik, kivéve az  $\varepsilon^{A_5}$  nívót, amely a  $\Delta_5$  kétdimenziós irreducibilis előállításhoz tartozik, és így semmi-

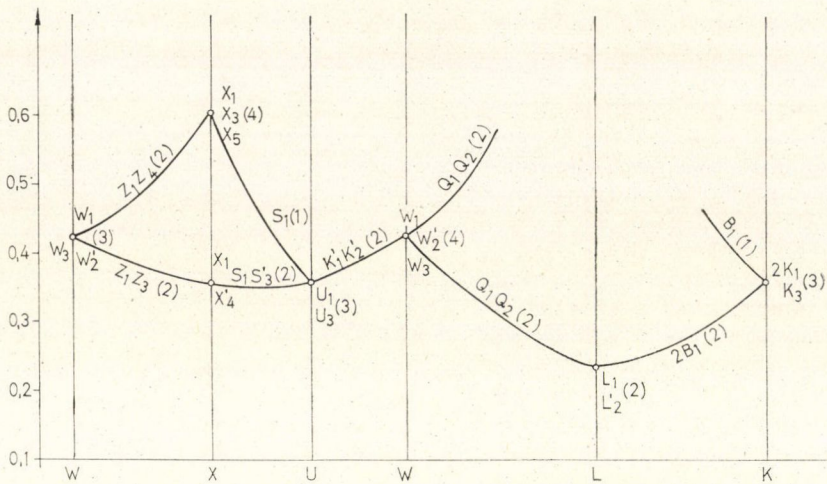


1.6. ábra. Szabad elektron energianívók a fcc rácsra a BZ  $\Gamma X$  iránya mentén. Az egyes görbék egyenletét, szimmetriajellegét és degenerációjának fokát is megadtuk









1.8. ábra. Szabad elektron energiagörbék lapon centrált köbös kristályrács esetén. Az energianívók rydbergekben a  $\Gamma_1=0$  nívóhoz viszonyítva vannak megadva. A legalacsonyabb energianívók szimmetriajellegét és degenerációjuk fokát is feltüntettük

### 1.6. A közel szabad elektron közelítés, az egyszerű pszeudopotenciál approximáció

Természetes lépés az előző fejezetbeli modell pontosítása felé, ha feltételezzük, hogy a fém elektronjai egy gyenge  $V(\mathbf{r})$  potenciál terében végzik mozgásaikat. Először azonban meg kell fogalmaznunk, mit értünk azon, hogy gyenge potenciál.

Mindenekelőtt feltételezzük, hogy a  $V(\mathbf{r})$  kristálpotenciál felépíthető az egyes  $\mathbf{R}_i$  rácspontokhoz tartozó atomi cellák  $V_a(\mathbf{r})$  potenciáljából egyszerű szuperpozíció-képpen

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_i} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (1.6.1)$$

Ez a feltevés már egy közelítést jelent, mert az egész fémre kiterjedő elektrongáz kicserélődési és korrelációs potenciálja nem additív az elemi cellák szerint. Ettől a hibától azonban most eltekintünk, és akkor  $V(\mathbf{r})$  Fourier sorát a következő alakban írhatjuk

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} A(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (1.6.2)$$

és

$$A(\mathbf{q}) = V(\mathbf{q}) S(\mathbf{q}) \quad (1.6.3)$$

és itt  $S(\mathbf{q})$  a „struktúra faktor”

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \quad (1.6.4)$$

melynek értéke tökéletes rácsú fémek esetében csak akkor különbözik nullától,



ha a  $\mathbf{q}$  vektor éppen a reciprok rács valamelyik  $\mathbf{K}$  vektorával esik egybe, és ekkor értéke 1. A  $V(\mathbf{q})$ -t ekkor szintén csak a  $\mathbf{K}$ -vektorok függvényének kell tekintenünk:

$$V(\mathbf{K}) = \frac{1}{\Omega} \int V_a(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \quad (1.6.5)$$

és az integrációs tartományt elegendő csak egy elemi cella  $\Omega$  térfogatára kiterjeszteni. A  $V(\mathbf{r})$  gyenge voltán most már azt értjük, hogy a potenciál  $V(\mathbf{K})$  Fourier-koefficiensei közül csak az első néhányat kell megtartanunk, és ezen együtthatók is kicsinyek a Fermi energiához képest. Ez azt jelenti, hogy  $V(\mathbf{r})$  nem sokban különbözik a konstans-potenciáltól.

Úgy gondolhatnánk, hogy ez a közel szabad-elektron közelítés még mindig igen durva közelítés, mivel legalább is az iontörzsek belsejében a  $V_a(\mathbf{r})$  potenciál igen gyorsan változó potenciál. Valójában nem ilyen bonyolult a helyzet. A kristály-potenciálról szóló 2. fejezetben majd még részletesebben is tárgyaljuk e kérdést, itt most csak annyit említünk meg, hogy a valenciaelektronok hullámfüggvényének a törzselektronokra való ortogonalitása ekvivalens azzal, hogy a törzsön belüli erősen vonzó  $V(\mathbf{r})$  potenciálhoz hozzáadódik egy taszító jellegű  $V_t(\mathbf{r})$  potenciál, mely a  $V(\mathbf{r})$  erős vonzó jellegét nagymértékben ellensúlyozza, s így az eredő ún. pszeudopotenciál már sokkal simább lefutású. A valenciaelektronok ténylegesen ezt a már gyenge  $V_a(\mathbf{r})$  pszeudopotenciált „érik”, melynek ezért magasabb Fourier-koefficiensei már valóban elhanyagolhatók.

A  $V_a(\mathbf{r})$  potenciál figyelembevételével a

$$H = -\alpha \nabla^2 + V_a(\mathbf{r}) \quad (1.6.6)$$

Hamilton operátornak mátrixelemei, továbbra is síkhullámok szerint képezve (1.5.5)-höz képest egy új taggal bővülnek

$$H_{ij}^v = \alpha \mathbf{k}_{vi}^2 \delta_{ij} + \frac{\sum_{\mu\mu'} g_{i\mu}^v g_{j\mu'}^v V(\mathbf{K}_{\mu\mu'})}{[\sum_{\mu} (g_{i\mu}^v)^2]^{1/2} [\sum_{\mu'} (g_{j\mu'}^v)^2]^{1/2}} \quad (1.6.7)$$

ahol  $\mathbf{K}_{\mu\mu'} = \mathbf{k}_{\mu} - \mathbf{k}_{\mu'}$ . Az  $\alpha$  „skalárfaktor” az effektív tömeg inverzével arányos együttható. Ha elhagyjuk itt a magasabb rendű  $V(\mathbf{K}_{\mu\mu'})$  Fourier-koefficienseket, akkor e bonyolult járulékos tag jelentékenyen egyszerűsödik. Lapon centrált köbös rács esetén az energiaskálát úgy választva, hogy  $V(0) = 0$  legyen, a legelső két koefficiens a  $\mathbf{K} = (2\pi/a)(1, 1, 1)$  ill.  $\mathbf{K} = (2\pi/a)(2, 0, 0)$  vektorokhoz tartozik, melyeket röviden  $V_{111}$  ill.  $V_{200}$ -al fogunk jelölni. Így elhanyagolva az összes többi, magasabbrendű Fourier-koefficiens az (1.6.7) mátrixelemekben három paraméter, az  $\alpha$  és a  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  szerepel mindössze, az energiasajátértékek is e három paraméter függvényei; megkísérélhetjük leírni a teljes  $\varepsilon(\mathbf{k})$  sávstruktúrát e három paraméter segítségével. Az  $A$  függelék táblázatai segítségével a szükséges  $g_{i\mu}^v$  együtthatók megkereshetők, az (1.5.2) szekuláris determináns felírható, és az  $\varepsilon^v$  energianívók meghatározhatók. A BZ szimmetriapontjaiban felírjuk azokat a formulákat, amelyek az ily módon előálló legalacsonyabb néhány energiaértékhez tartoznak:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{X_1} &= \alpha \mathbf{k}_x^2 + V_{200} \\ \varepsilon^{X'_1} &= \alpha \mathbf{k}_x^2 - V_{200} \end{aligned} \quad (1.6.8)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon^{L_1} &= \alpha \mathbf{k}_L^2 + V_{111} \\ \varepsilon^{L_2} &= \alpha \mathbf{k}_L^2 - V_{111} \end{aligned} \quad (1.6.9)$$



$$\begin{aligned}\varepsilon^{W_1} &= \alpha \mathbf{k}_W^2 + V_{200} + 2V_{111} \\ \varepsilon^{W_2} &= \alpha \mathbf{k}_W^2 + V_{200} - 2V_{111} \quad (\text{kétszeresen degenerált nívó})\end{aligned}\quad (1.6.10)$$

$$\begin{aligned}\varepsilon^{W_3} &= \alpha \mathbf{k}_W^2 - V_{200} \\ \varepsilon_1^K &= \alpha \mathbf{k}_K^2 + \frac{1}{2} V_{200} - \frac{1}{2} (V_{200}^2 + 8V_{111}^2)^{1/2} \\ \varepsilon_2^K &= \alpha \mathbf{k}_K^2 + \frac{1}{2} V_{200} + \frac{1}{2} (V_{200}^2 + 8V_{111}^2)^{1/2} \\ \varepsilon^K_3 &= \alpha \mathbf{k}_K^2 - V_{200}\end{aligned}\quad (1.6.11)$$

Itt  $\mathbf{k}_X, \mathbf{k}_L, \mathbf{k}_W, \mathbf{k}_K$  jelentik rendre az  $X, L, W, K$  pontokba mutató  $\mathbf{k}$  vektorokat. Ezen igen egyszerű képletek is, de főképp a mögöttük rejlő fizikai közelítés, a közel szabad-elektron, vagy más szóval az egyszerű pszeudopotenciális közelítés igen fontos szerepet játszik napjainkban a szilárdtestek fizikájában. Legyen szabad itt néhányat röviden megemlíteni.

Az (1.6.8)–(1.6.11) képletek szemléletesen mutatják a szabad elektron közelítés esetében nyert degenerációk közül mindazoknak a feloldódását, melyek nem a kristályszimmetria következményei. Az  $X$ -pontban például a szabad elektron közelítésben az  $\varepsilon^{X_1}, \varepsilon^{X_4}$  energianívók egybeestek. Most e két nívó szétvált, és az energiarés nagysága éppen  $2|V_{200}|$ . Ha  $V_{200} < 0$ , akkor az  $X_1$  nívó alacsonyabban fekszik, mint az  $X_4$  és ha  $V_{200} > 0$ , akkor fordítva. Ugyanígy az  $L$  pontban is, ahol az energiarés  $2|V_{111}|$ . Ha tehát valamilyen kísérleti úton ezen  $X$  és  $L$  pontbeli energiaréseket meg tudjuk határozni, azzal közvetlen felvilágosítást kaphatunk a  $V(\mathbf{r})$  kristálpotenciál két első Fourier-koefficiensére. Képleteink tehát mintegy a kristálpotenciál „kimerését” segítik elő. Az  $X$  és  $L$ -beli felhasadásokból számított  $V_{111}$  és  $V_{200}$  együtt-hatók természetesen megadnak egy számítható felhasadást a  $W$  és  $K$  pontokban is, melynek a mért felhasadásokkal való összevetéséből ellenőrizhetjük modellünk pontosságát. Az egyszerű pszeudopotenciális közelítés akkor megengedhető, ha ugyanazokkal a paraméterekkel valamennyi energiaszint leírható. Az  $\alpha$  „skálafaktor” közvetlenül kiszámítható az azonos pontokhoz tartozó energiaértékek számtani közepéből, amely még lehet pontonként más és más, mivel ez a  $\mathbf{k}$ -tól függő effektív elektrontömeggel fordítva arányos mennyiség, s melynek mérésére ismét vannak lehetőségek.

A  $W$ -pontbeli (1.6.10) energiaértékeket négy síkhullámból számíthatjuk, azokból, amelyekhez  $(2\pi/a = 1)$  egységekben) a következő hullámszám vektorok tartoznak:

$$(1, 1/2, 0); \quad (-1, 1/2, 0); \quad (0, -1/2, 1); \quad (0, -1/2, -1) \quad (1.6.13)$$

Ez a négy síkhullám a

$$\mathbf{k}_W + \mathbf{K}_i \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (1.6.14)$$

alakban állítható elő, ahol a  $\mathbf{K}_i$ -k reciprokrács vektorok.

$$\begin{aligned}\mathbf{K}_1 &= (0, 0, 0) & \mathbf{K}_3 &= (-2, 0, 0) \\ \mathbf{K}_2 &= (-1, -1, 1) & \mathbf{K}_4 &= (-1, -1, -1)\end{aligned}\quad (1.6.15)$$

Ugyanezen négy  $\mathbf{K}_i$  vektorból a BZ tetszés szerinti  $\mathbf{k}$  pontjából kiindulva is



megalkothatjuk a  $\mathbf{k} + \mathbf{K}_i$  hullámszámvektorokat, melyekhez tartozó síkhullámokból az általános helyzetű  $\mathbf{k}$  pontban egy negyedrendű  $H_{ij}(\mathbf{k})$  energiamátrix írható fel:

$$H_{ij}(k) = \begin{pmatrix} \alpha k^2 & V_{200} & V_{111} & V_{111} \\ V_{200} & \alpha(\mathbf{k} + \mathbf{K}_2)^2 & V_{111} & V_{111} \\ V_{111} & V_{111} & \alpha(\mathbf{k} + \mathbf{K}_3)^2 & V_{200} \\ V_{111} & V_{111} & V_{200} & \alpha(\mathbf{k} + \mathbf{K}_4)^2 \end{pmatrix} \quad (V[0]=0) \quad (1.6.16)$$

melyből a

$$\det |H_{ij}(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k})\delta_{ij}| = 0 \quad (1.6.17)$$

szekuláris egyenlet segítségével a BZ bármely  $\mathbf{k}$  pontjában meghatározhatjuk az  $\varepsilon(\mathbf{k})$  energiaértékeket, ha az  $\alpha$ ,  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  paramétereket ismerjük. Így az (1.6.16)—(1.6.17) képleteket úgy tekinthetjük, mint interpolációs eljárást. Ha például egy teljes sávstruktúra számításból ismerjük a  $W$  pontban a három  $\varepsilon^{W_1}$ ,  $\varepsilon^{W_2}$ ,  $\varepsilon^{W_3}$  energiaértéket, akkor ezekből (1.6.10)-et felhasználva az  $\alpha$ ,  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  paraméterek meghatározhatók, majd ezekből az (1.6.16)—(1.6.17)-et interpolációs eljárásnak tekintve valamennyi  $\mathbf{k}$  pontban megkapható az  $\varepsilon(\mathbf{k})$ . Ilyen számításokat végzett Harrison (1960) az alumíniumra, felhasználva Heine (1957) részletes, az ortogonalizált síkhullámok módszerével végzett számításait. Érdeemes megjegyezni, hogy Harrison ezzel az eljárással 0,03 rydberg pontossággal reprodukálni tudta Heine eredményeit.

Az (1.6.16)—(1.6.17) egyenletek viszonylagos egyszerűségüknél fogva arra is alkalmasak, hogy ismerve az  $\alpha$ ,  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  paramétereket, meghatározzuk azokat a  $\mathbf{k}$  vektorokat a BZ-ben, melyek ugyanazon  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{konst.}$  energiához tartoznak, köztük az  $\varepsilon_F$  Fermi-energiához tartozó Fermi felület. Ily módon a Fermi-felület is az  $\alpha$ ,  $V_{200}$ ,  $V_{111}$  értékekkel parametrizálható, ami a tapasztalattal való összehasonlítás számára tág lehetőségeket jelent, tekintettel a Fermi-felület geometriai alakjára vonatkozó sokoldalú és pontos kísérleti eredményekre. Fordítva, a Fermi-felület alakjára vonatkozó mérésekből következtetni lehet az  $\alpha$ ,  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  paraméterekre. Az első ilyen jellegű munkát Ashcroft (1963) végezte, aki az alumínium Fermi-felületének részletes felméréséből a  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  paramétereket „visszaszámolta” három értékes számjegy pontossáig. Azóta is úgy tekintik értékeit, mint  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  kísérleti értékeit, melyet valamire való elméleti számításnak minél pontosabban meg kell közelítenie. Hasonló eredményekről számolt be újabban Anderson és Gold (1965) az ólom, valamint Lin és Phillips (1965) a szilícium, germánium és szürke-ón esetére.

Az egyszerű pszeudopotenciál közelítés napjainkban már igen kiterjedt irodalommal rendelkezik, melynek áttekintésére természetesen nem térhetünk ki. A módszer fizikai alapjaira rávilágító és a korábbi eredményeket is ismertető cikk jelent meg Gombás (1965) professzor tollából, ahol részletes hivatkozások találhatók a később kifejlődött angol—amerikai irodalmat (Harrison, 1966) megelőző publikációkra is. Most az egész módszerrel kapcsolatban csak két problémára akarjuk a figyelmet felhívni. Az első elvi jellegű: nem szabad megfedkezünk arról, hogy a pszeudopotenciál nem lokális olyan értelemben, hogy nemcsak az  $\mathbf{r}$  helyzetvektor-nak, hanem a tekintett  $\mathbf{k}$  állapotnak is (vagyis az energiának és az impulzusmomentumnak is) függvénye lehet. Azaz, szigorúan véve, a  $V_{111}$  és  $V_{200}$  paraméterek  $\mathbf{k}$ -függők, így nem lepődünk meg, ha a BZ-ban mindenütt azonos  $V_{111}$  és  $V_{200}$  értékek nem írják le helyesen — legalábbis bonyolultabb esetekben — a teljes sávstruktúrát. A másik, inkább praktikus jellegű: elképzelhető, hogy pusztán a két legalacsonyabb



rendű Fourier koefficiens figyelembevétele nem elegendő és ha pontosabb eredményeket kívánunk elérni, úgy a magasabb rendű koefficiensek sem hanyagolhatók el.

Sajnos a kalcium, bárium és stroncium esetében meglehetősen kevés kísérleti adat áll rendelkezésünkre a Fermi-felület alakjára vonatkozóan, és a meglevők is elég bizonytalanok ahhoz, hogy belőlük következtetni lehessen a  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  Fourier-koefficiensekre. Egyébként is fennáll az az alapos gyanú, hogy a fémeknél az  $s$ ,  $p$  nívók mellett jelentős szerep jut az eggyel alacsonyabb főkvantumszámhoz tartozó  $d$  nívóknak is, ami valószínűvé teszi, hogy az egyszerű pszeudopotenciál közelítés, mely mindössze két, a  $\mathbf{k}$ -tól független, lokális  $V_{111}$ ,  $V_{200}$  paramétereket használ a teljes sávstruktúra és a Fermi-felület jellemzésére, nem jelent elfogadható közelítést. Ezért a következő néhány fejezetben a kalcium fém  $V_a(\mathbf{r})$  potenciálját tesszük alapos vizsgálat tárgyává, hogy eldöntsük, milyen fokú közelítést kell alkalmaznunk a sávstruktúra meghatározására.

## 2. A kristálypotenciál

Elektronok kristálybeli sávos energiaszerkezetének számításainál sűrűn hangúlyozott tény az, hogy legalábbis a sávszerkezet abszolút helyzete lényegesen függ a kristálypotenciál helyes megválasztásától. Ugyanakkor a kristálypotenciál helyes megválasztása meglehetősen bonyolult feladat. A szokásos egy-elektron közelítésnek az alapegyenlete a vezetési elektronokra vonatkozó Hartree—Fock egyenlet, melyben a potenciál két fő tagból tevődik össze, az iontörzstől származó és a vezetési elektronoktól származó tagból. Ezekhez járul a kicserélődési tag, beleértve a törzs- és vezetési elektronok közötti, valamint ezen elektronok egymásközi kicserélődéséből származó járulékot. A Hartree—Fock módszer kiegészítéseként a korrelációs korrekciót is figyelembe vehetjük. E potenciálok kiszámítása rendkívül bonyolult és például a korrelációs járulék esetében elvileg sem teljesen megalapozott. Ha ragaszkodunk ahhoz, hogy pusztán elvi alapokból kiindulva építsük fel a kristálypotenciált, a tényleges számítások numerikus keresztülvihetősége érdekében olyan engedelményeket kell tennünk, amelyek komolyan veszélyeztetik a nyert potenciál fizikai realitását (pl. az említett kicserélődési potenciált a vezetési elektronok állapotától, azaz  $\mathbf{k}$ -tól függő potenciálnak kellene tekinteni, melynek kiszámításához már szükséges lenne ismerni a vezetési elektron hullámfüggvényeit, a korrelációs potenciáltól származó bár kicsiny, de nem elhanyagolható korrekció egyáltalán nem additíve tevődik össze a törzs- és vezetési elektronok járulékaiból). Az is erősen kétségbevonható, hogy a szabad atom vagy ion hullámfüggvényei ill. energiasajátértékei mennyiben tekinthetők változatlanoknak, ha az atom vagy ion egy fém szerkezet rácsába épül be, hiszen itt ezen függvények és energiák a *kristálypotenciált* tartalmazó  $H$  Hamilton operátornak lesznek sajátfüggvényei ill. sajátértékei, nem pedig a szabad atom (ion) Hamilton operátorának. Így elvileg a törzselektronok sajátértékegyenletét is még meg kellene oldani a kristálypotenciál ismeretében, ha ezen hullámfüggvényeket ill. energiákat fel akarjuk használni a vezetési elektronokra vonatkozó, például az ortogonalizált síkhullámok módszerével végzett számítások esetén.

A másik lehetőség az, ha lemondunk a potenciál *a priori* meghatározásáról, megpróbálunk egy félempirikus potenciált bevezetni oly módon, hogy néhány paraméter kísérleti adatokhoz való „fitelésével” egy viszonylag könnyen kezelhető, de lehetőleg nagypontosságú kristálypotenciált kapjunk. Ez az alapgondolata a



„kvantum hiány módszernek” (Ham, 1955; Brooks és Ham, 1958), melyet Ham (1962) nagy sikerrel alkalmazott az alkáli fémek sávstruktúrájának, Fermi-felületének és még számos más tulajdonságainak összefoglaló tárgyalására, valamint a Heine, Abarenkov és Animalu (Heine és Abarenkov 1964; Abarenkov és Heine 1965; Animalu 1969; Animalu és Heine 1965; a továbbiakban ezen négy alapvető cikkre csak az I, II, III, IV számokkal fogunk hivatkozni) által kidolgozott „leárnýékolt modell potenciálnak”, melynek tudomásunk szerint jelen disszertáció számításai jelentik az első alkalmazását fémek sáv szerkezetének a meghatározására.

A soron következő néhány fejezetben bemutatjuk azt az eljárást, amellyel a leárnýékolt modell potenciál meghatározható, majd megvizsgáljuk ennek néhány tulajdonságát a kalcium fém esetén. A tárgyalás követi a potenciál felépítésének három lépését: 1. Először meghatározzuk a szabad ion potenciálját, majd 2. az ionokat a kristály rácspontjaiba képzelve beágyazzuk egy merevnek képzelt elektron „zselé”-be, ezen rendszer szolgáltatja az előbbi potenciálhoz az ún. ortogonalitási és korrelációs korrekciót és végül 3. az elektron zselét engedjük „megolvadni”, azaz az elektronokat mozogni, ami az ionpotenciálok leárnýékolását eredményezi.

### 2.1. A modell potenciál

Ebben a fejezetben megvizsgáljuk azt a potenciált, amit egy szabad ionhoz hozzáadott, járulékos valenciaelektron „érez”. A probléma tulajdonképpen a

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_v(\mathbf{r}) = E \psi_v(\mathbf{r}) \quad (2.1.1)$$

Schrödinger-egyenlet megoldása, ahol  $V(\mathbf{r})$  az iontörzstől származó potenciál  $\psi_v(\mathbf{r})$  és  $E$  pedig a hozzáadott elektron hullámfüggvénye ill. energiája.

D. R. Hartree és W. Hartree (1938) a problémát a  $\text{Ca}^{2+}$  ionra a self-consistent-field módszerrel már megoldották, mi most azonban olyan eljárást akarunk keresni, amely a stroncium és bárium esetében is alkalmazható, és amelyből nyert eredmények átvitele a kristályba beépült ion esetére nem kívánja a Schrödinger-egyenlet újramegoldását egy módosított  $V(\mathbf{r})$  potenciállal.

A Heine és munkatársai által bevezetett modell potenciál a pszeudopotenciál formalizmusból fejlődött ki. Jelölje a (2.1.1) Schrödinger egyenletbeli

$$H_0 = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.1.2)$$

Hamilton operátornak a törzs-, illetve valenciaállapotaihoz tartozó sajátfüggvényeit  $\psi_t$  és  $\psi_v$ .

Vezessünk be egy új  $\Phi$  függvényt a

$$\Phi = \psi_v + \sum_t \alpha_t \psi_t \quad (2.1.3)$$

definícióval, ahol az összegzés az iontörzs betöltött  $t$  állapotaira vonatkozik. Egyszerű számolással

$$H_0 \Phi + \sum_t \alpha_t (E - E_t) \psi_t = E \Phi \quad (2.1.4)$$



Szorozva ezen egyenlet mindkét oldalát egy  $\psi_{t'}$  törzsfüggvénnyel és integrálva kapjuk

$$E_{t'} \langle \psi_{t'} | \Phi \rangle + \alpha_{t'} (E - E_{t'}) = E \langle \psi_{t'} | \Phi \rangle$$

$$\alpha_{t'} = \langle \psi_{t'} | \Phi \rangle \quad (2.1.5)$$

Vagyis a (2.1.4)-beli járulékos tagot egy  $V_R(\mathbf{r})$  potenciálként értelmezhetjük, melynek hatását egy tetszés szerinti  $f(\mathbf{r})$ -függvényre a

$$V_R(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) = \sum_t \langle \psi_t | f(\mathbf{r}) \rangle (E - E_t) \psi_t \quad (2.1.6)$$

integrál-operátorral tudjuk kifejezni. A (2.1.4) egyenlet azonban ismét egy Schrödinger-egyenlet, melyben az

$$U(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + V_R(\mathbf{r}) \quad (2.1.7)$$

potenciált pseudopotenciálnak, a  $\Phi$  hullámfüggvényt pseudohullámfüggvénynek nevezzük.

Minthogy a járulékos valenciaelektron  $E$  energiája mindig nagyobb az  $E_t$  törzsenergiáknál, azért

$$\langle f(\mathbf{r}) | V_R(\mathbf{r}) | f(\mathbf{r}) \rangle = \sum_t |\langle \psi_t | f(\mathbf{r}) \rangle|^2 (E - E_t) \geq 0 \quad (2.1.8)$$

azaz a  $V_R(\mathbf{r})$  potenciál tasztító jellegű, szemben a vonzó  $V(\mathbf{r})$  potenciállal. Világos továbbá, hogy a  $V_R(\mathbf{r})$  potenciál gyakorlatilag az iontörzsön belül válik jelentékennyé, mivel a  $\psi_t$  törzsfüggvények az iontörzs sugarán kívül már elhanyagolhatóan kicsiny értékeket vesznek fel, vagyis a tasztító  $V_R(\mathbf{r})$  potenciál ellensúlyozni tudja az iontörzsön belül erősen vonzó  $V(\mathbf{r})$  potenciál hatását, minek eredményeképpen az  $U(\mathbf{r})$  pseudopotenciál esetleg egy viszonylag sima függvény lehet. Ez az ún. „kiegyenlítődési tétel” azt eredményezi, hogy a  $\Phi$  pseudohullámfüggvény is közel lehet a szabad részecskéket reprezentáló síkhullámokhoz.

Könnyen megmutatható (Austin és mások, 1962), hogy a pseudopotenciál és pseudohullámfüggvények fenti választása egyáltalán nem egyértelmű. (2.1.6) helyett a

$$V_R f(\mathbf{r}) = \sum_t \langle F_t(\mathbf{r}) | f(\mathbf{r}) \rangle \psi_t(\mathbf{r}) \quad (2.1.9)$$

potenciál, tetszés szerinti  $F_t(\mathbf{r})$  függvények esetén, a valenciaelektronok számára ugyanazon energiaspektrumot szolgáltatja. A valenciaelektron hullámfüggvénye most is (2.1.3) alakú, de az  $\alpha_t$  együtthatók természetesen függenek az  $F_t(\mathbf{r})$  függvények megválasztásától, és most (2.1.5)-nél bonyolultabb egyenletekből számíthatók ki. Érdemes megemlíteni, hogy a pseudopotenciálok ezen általános formalizmusa magában foglalja az ortogonalizált síkhullámok módszerét is. Ha ugyanis (2.1.3)-ben a  $\Phi$  pseudohullámfüggvényt síkhullámnak választjuk, és az  $\alpha_t$  együtthatókat úgy választjuk, hogy  $\psi_t$  ortogonális legyen a  $\psi_t$  törzsállapotokra, akkor az  $\alpha_t$  „ortogonalizációs együtthatókra” éppen a (2.1.5) feltételt nyerjük.

Nem feltétlenül szükséges azonban ragaszkodnunk a pseudopotenciálok elméletének most kifejtett formalizmusához, azaz a (2.1.3) alakú hullámfüggvényekhez, és a (2.1.9) alakú potenciálokhoz. Az egyetlen lényeges követelményünk csak az, hogy az eredeti Schrödinger egyenlet helyett bevezetett

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_M(\mathbf{r}) \right] \Phi_M = E \Phi_M \quad (2.1.10)$$



„modell” Schrödinger egyenlet — legalábbis egy, az alkalmazások szempontjából fontos energiatartományban ugyanazon  $E$  sajátértékeket szolgáltatassa, mint az eredeti (2.1.1) egyenlet. A  $V_M(\mathbf{r})$ -et modell potenciálnak, a  $\Phi_M$ -et modell hullámfüggvénynek fogjuk nevezni.

Természetesen várható, hogy a (2.1.10) egyenlettel definiált  $V_M(\mathbf{r})$  modell potenciál függeni fog azoktól az állapotoktól, melyeknek  $E$  energiáját meg kell, hogy adja. Szabad ionok centrálszimmetrikus erőterében ez azt jelenti, hogy a  $V_M(\mathbf{r})$  modellpotenciál függ (1) az  $l$  mellékkvantumszámtól (azaz a pályaimpulzusmomentumtól) és (2) az  $n$  fő kvantumszámtól. Analitikusan ez úgy írható fel, hogy

$$V_M(\mathbf{r}) = \sum_l V_l(E, r) P_l \quad (2.1.11)$$

ahol a  $P_l$  operátor egy projekciós operátor, mely egy tetszés szerinti  $f(r, \theta, \varphi)$  függvényt az azonos  $l$ -ű függvények alterébe vetít. Ha ezen alteret az  $Y_{lm}$  ( $m = -l, \dots, l$ ) gömbfelületi függvényekkel feszítjük ki, akkor

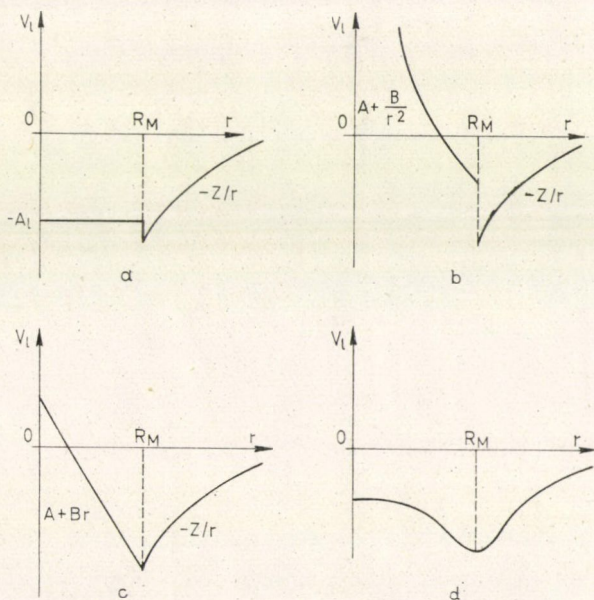
$$P_l f(r, \theta, \varphi) = \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \int Y_{lm}^*(\theta', \varphi') f(r, \theta', \varphi') d\Omega' \quad (2.1.12)$$

Más szóval  $P_l$  megadja  $f$ -nek az  $l$  impulzusmomentumhoz tartozó komponensét.

A  $V_l(E, r)$  függvények lefixált  $l$  esetén még az  $n$  fő kvantumszám függvényei lehetnek, tulajdonképpen így az  $E$  energiának, ezért írtuk az argumentumba az  $E$ -t is.  $V_l(E, r)$  az  $\mathbf{r}$  egyszerű analitikus függvényei, melyek még tartalmaznak egy vagy két szabadon hagyott paramétert. E paramétereket úgy akarjuk meghatározni, hogy a (2.1.10) modell Schrödinger egyenlet  $E$  sajátértékei meg egyezzenek a szabad ion valenciáelektronjainak empirikus energianívóival. Abarenkov és Heine (II) többféle analitikus kifejezést megvizsgáltak (lásd 2.1. ábrát) és lefixált  $l$ -re a leg-simább  $E$ -függést a következő alakú egyszerű potenciálnál találták

$$V_l(\mathbf{r}) = \begin{cases} -A_l & \text{ha } r < R_M \\ -Z/r & \text{ha } r \geq R_M \end{cases} \quad (2.1.13)$$

ahol az  $A_l$  paraméterek  $r$ -től már nem, és az  $E$  energiától is csak gyengén függő függvények,  $Z$  az ionizációs fok ( $\text{Ca}^{2+}$  esetén  $Z=2$ ). Targyalásaink során mindvégig feltesszük, hogy  $A_2 = A_l$ , ha  $l \geq 2$ , azaz az elektron hullámok  $d$ ,  $f$ ,  $g$ , ... szimmetriájú kompo-



2.1. ábra. Abarenkov és Heine (1965) által vizsgált modell potenciálok



nenseire gyakorolt hatások között már nem teszünk különbséget. (A fémekben a magasabb impulzusmomentumú  $f, g, \dots$  állapotok rendszerint már jóval a Fermi energia fölé esnek, így gyakorlati szempontból nem szükséges ezen nívók pontos ismerete.) Az  $R_M$  modellrádiusz önkényesen választható érték valahol a tényleges ionrádiusz és a Wigner-Seitz sugár között. Úgy várjuk, hogy legalábbis a fizikailag értelmezhető eredményeknek nem szabad függni az  $R_M$  modell sugár megválasztásától.

A (2.1.13) modellpotenciál szemléletesen fejezi ki a korábban már említett „kiegyenlítődési tételt”. Az  $R_M$  modell sugáron kívül a potenciál tisztán Coulomb-szerű, azon belül azonban az erős vonzó jellegű Coulomb-potenciált „kiegyenlítetté” egy  $l$ -től függő  $A_l$  állandó értékre a valenciaelektronok hullámfüggvényeinek gyors változásához tartozó nagy kinetikus energia tag, vagy más szóval a Pauli elv, amely megtiltja, hogy további elektronok épüljenek be az iontörzs belső állapotaiba, ami mintegy taszító potenciált jelent a valenciaelektronok számára. Ugyanakkor az a tény, hogy a potenciál konstans az  $R_M$  sugáron belül egyben előnyös abból a szempontból is, hogy a  $\Phi_M$  modell hullámfüggvények e tartományon belül jól lesznek közelíthetők egyszerű síkhullámokkal.

Az  $A_l$  együtthatók meghatározása végett vegyük fel modellfüggvényünket a szokásos

$$\Phi_M = \frac{\chi(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.1.14)$$

alakban, ahol  $\chi(r)$  kielégíti a

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_l(r) \right] \chi(r) = E\chi(r) \quad (2.1.15)$$

radiális egyenletet. Ezen egyenlet megoldása az atomi rendszereknél szokásos módon (Hartree, 1957) történik: elindulunk a numerikus integrálással az origóból kifelé, majd a végtelenből az origó felé, és a két megoldást illesztjük az  $R_M$  modell-rádiusz-nál. Ez az illesztés azt jelenti, hogy a kifelé futó megoldás és a befelé futó megoldások logaritmikus deriváltjainak meg kell egyezniük az  $R_M$  pontban.

Most azonban nem szükséges az integrálást numerikusan lépésről lépésre elvégezni, mivel mindkét tartományban a  $V_l(r)$  potenciál olyan, hogy a megfelelő radiális hullámegyenletek megoldása jól ismert függvényekből előállítható. Az  $R_M$  sugáron kívül a potenciál tisztán Coulomb-szerű, így a radiális egyenlet két lineárisan független megoldásai az  ${}^0U^l$ , ill.  ${}^1U^l$  Coulomb-hullámfüggvények, melyek rendre az origóban reguláris, illetve irreguláris függvények. Ha (2.1.15)-nek olyan megoldását keressük, amely a végtelenben exponenciálisan csökken, akkor ezt a

$$\chi(r) = {}^0U^l(Zr) + \gamma(N, l) {}^1U^l(Zr) \quad (2.1.16)$$

lineárkombináció állítja elő, ahol a  $\gamma(N, l)$  együtthatóra érvényes (Ham, 1955, 147—9. oldal)

$$\gamma(N, l) = \frac{\Gamma(N-l) \tan[\pi(N-l-1)N^{2l+1}]}{\Gamma(N+l+1)} \quad (2.1.17)$$

Az  $N$  paraméter az  $E$  energiából határozható meg az

$$\frac{1}{N^2} = \frac{2|E|}{Z^2} \quad (2.1.18)$$



összefüggés segítségével ( $E$  atomi egységekben). Az  ${}^0U^l$ ,  ${}^1U^l$  függvények, valamint ezek deriváltjai a

$$D^l = \varrho \frac{d}{d\varrho} U^l(\varrho) \quad (2.1.19)$$

függvények jól ismert, táblázatosan adott függvények (*Blume és mások*, 1959), ezért a  $\chi'(r)/\chi(r)$  logaritmikus derivált felírása az  $r=R_M$  helyen minden további nélkül elvégezhető, ha az  $E$  energiaérték ismeretes.

Az  $R_M$  sugáron belül a  $\chi(r)/r$  függvény nem más, mint a jól ismert szférikus (feles indexű) Bessel függvény, mely a szinusz és koszinusz függvényekkel egyszerűen kifejezhető. Egyenlővé téve a kifelé és befelé futó megoldások logaritmikus deriváltjait az  $R_M$  sugárnál, a következő egyenleteket kapjuk:

$$\frac{X_{j_{l-1}}(X)}{j_l(X)} = \frac{{}^0D^l(ZR_M) + \gamma(N, l){}^1D^l(ZR_M)}{{}^0U^l(ZR_M) + \gamma(N, l){}^1U^l(ZR_M)} \quad (2.1.20)$$

ahol

$$X = [2(A_l - |E|)]^{1/2} R_M \quad (2.1.21)$$

Az  $A_l$  együtthatók megkeresésének módja tehát a következő: Kiválasztjuk a  $\text{Ca}^{2+}$  ionhoz kötött egy valenciaelektron egyik energianívóját, mondjuk a  $4p$  nívót. Az  $E_{4p}$  energiaérték gyanánt a  $4p$  nívó kísérleti értékét választjuk, ezzel a (2.1.20) egyenlet jobb oldala az idézett táblázatok segítségével meghatározható, így egy trigonometrikus egyenletet nyerünk  $X$ -re, melyet megoldva (2.1.21)-ből közvetlenül kapjuk az  $A_l$  paramétert. Ez utóbbi egyenlet az

$$X = \left[ 2 \left( \frac{A_l}{Z^2} - \frac{|E|}{Z^2} \right) \right] (ZR_M) \quad (2.1.22)$$

alakban is írható, s akkor ez a (2.1.20) egyenlettel úgy tekinthető, mely implicite definiálja az  $E/Z^2$  mennyiséget a  $ZR_M$  és az  $N$  függvényében. Az  $N$  (2.1.18) szerint az  $E$  energiát adja meg. A 2.1. táblázat és 2.2. ábra mutat egy jellegzetes példát az eredményekből. Sokkal bővebb táblázat található Abarenkov-nál (1965), aki a

$$\begin{aligned} ZR_M = 2,0 \quad (0,5) \quad 15,0 \\ (2.1.23) \\ N = 1,3 \quad (0,1) \quad 4,3 \end{aligned}$$

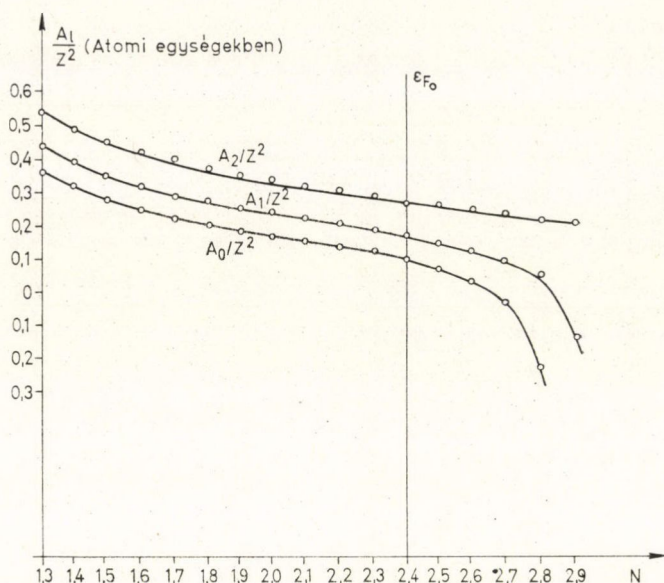
2.1. TÁBLÁZAT

$N$	$l=0$	$l=1$	$l=2$
1,3	0,36351	0,43962	0,54160
1,4	0,32003	0,39453	0,49555
1,5	0,28427	0,35725	0,45747
1,6	0,25430	0,32583	0,42545
1,7	0,22870	0,29885	0,39809
1,8	0,20638	0,27527	0,37436
1,9	0,18651	0,25427	0,35347
2,0	0,16835	0,23518	0,33484
2,1	0,15123	0,21743	0,31798
2,2	0,13441	0,20048	0,30250
2,3	0,11693	0,18374	0,28805
2,4	0,09725	0,16649	0,27433
2,5	0,07236	0,14767	0,26103
2,6	0,03505	0,12544	0,24781
2,7	-0,03664	0,09602	0,23425
2,8	-0,23841	0,04980	0,21979
2,9	0,17825	-0,04579	0,20348

A modell potenciál  $A_l$  paramétereit tartalmazó  $A_l/Z^2$  függvény numerikus értékei az  $N=Z/\sqrt{2|E|}$  változó függvényében  $ZR_M=7,0$  (atom egység) értékekre Abarenkov (1965) nyomán.

értékekre adta meg az  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$  paramétereket, ami azt jelenti, hogy e táblázatokból interpolálás révén gyakorlatilag tetszés szerinti ionra meghatározható a  $V_M$  modellpotenciál. A 2.2. ábrából is látható, hogy az együtthatók viszonylag nagy energiatartományban közel lineáris függvényei az energiának.





2.2. ábra. A modellpotenciál  $A_i$  paramétereinek függése az  $E$  energiától.  $A_i$  és  $E$  atomi egységekben van megadva,  $N^2 = Z^2/2|E|$ , és  $ZR_M = 7,0$  atomi egység

Hangsúlyoznunk kell, hogy a (2.1.11)–(2.1.13) modell potenciál konstrukciójánál fogva magában foglalja a valenciaelektronnak a törzselektronokkal való kicserélődési potenciálját, valamint a korrelációs korrekciót is, mivel az  $A_i$  együtthatók közvetlen az empirikus energiaértékekből lettek „visszaszámolva”. Ilyen értelemben a modell potenciál egzaktnak tekinthető.

## 2.2. A szabályos ionrács potenciálja, a merev elektrontenger korrekciói

Következő lépésben a már ismert potenciállal rendelkező ionokat a kristály rácspontjaiba képzeljük, és az egész kristályt kitöltjük egy merevnek képzelt elektron „zsélé”-vel. E rendszer potenciálját határozzuk meg e fejezetben.

A potenciál most is az elemi cellák potenciáljaiból építhető fel, mint (1.6.1)-ben, így elegendő az egy atomi cellán belüli  $V_a(\mathbf{r})$  potenciált megkeresni. Ez most két részből tevődik össze: a) a cella (merevnek képzelt) elektrongázának potenciáljából, és b) a nyugalomban levőnek képzelt ion potenciáljából.

a) Az elektrongáz nem egészen egyenletesen oszlik el már nulladik közelítésben sem a teljes atomi cellában. A vezetési elektronoknak az iontörzs elektronjaira való ortogonalitása miatt valamivel kisebb a vezetési elektronok sűrűsége az iontörzsen belül, mint kívül. Feltételezzük, hogy a teljesen egyenletes eloszláshoz képest az  $R_c$  ion-törzsen belül egy  $\alpha Z$  nagyságú, nagyjából egyenletes eloszlású pozitív



töltést jelent az, hogy a valenciaelektronok „ki vannak tiltva” a törzsből. Ez a járulékos

$$\varrho_{0c}(r) = \begin{cases} \alpha Z / \left( \frac{4\pi}{3} R_c^3 \right) & \text{ha } r < R_c \\ 0 & \text{ha } r \geq R_c \end{cases} \quad (2.2.1)$$

töltéssűrűség a

$$\Delta V_{0c}(\mathbf{r}) = -4\pi\varrho_{0c}(\mathbf{r}) \quad (\text{atomi egységekben}) \quad (2.2.2)$$

Poisson-egyenleten keresztül a  $V_{0c}(\mathbf{r})$  potenciálra vezet, melyet ortogonalitási korrekciónak nevezünk. Ez nyilván egy egyszerű elektrosztatikus potenciál, melynek Fourier koefficienseire még a  $B$  függelékben visszatérünk.

Az  $\alpha$  paraméter megbecslése végett tételezzük fel, hogy a valenciaelektron hullámfüggvénye egy ortogonalizált síkhullám a

$$\psi_v = \frac{1}{\Omega^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \sum_t \alpha_t \psi_t \quad (2.2.3)$$

alakban, ahol az  $\alpha_t$  együtthatók az ortogonalizációs együtthatók. Az  $\Omega$  tartományt felbontva egy az iontörzsön belüli  $\Omega_b$  és egy azon kívüli  $\Omega_k$  tartományra, érvényes

$$\int_{\Omega} |\psi_v|^2 d^3\mathbf{r} = \int_{\Omega_b} |\psi_v|^2 d^3\mathbf{r} + \int_{\Omega_k} |\psi_v|^2 d^3\mathbf{r} = 1 + \sum_t |\alpha_t|^2 \quad (2.2.5)$$

Az  $\alpha_t$  együtthatók síkhullámok és törzsfüggvények átfedési integráljai. Az előbbieket az  $\Omega$  elemi cellára, az utóbbiak a  $\Omega_b$  iontörzsre vannak normálva. (Az iontörzsön kívül úgyis eltűnnek.) Ez egy  $(\Omega/\Omega_b)^{-1/2}$  szorzófaktor jelent. Maga az integrál durván  $\Omega_b$ -vel arányos, így közelítő becslést kapunk ha feltételezzük, hogy

$$\sum_t |\alpha_t|^2 \sim \frac{\Omega_b}{\Omega} \quad (2.2.6)$$

De a (2.2.5)–(2.2.6) képletek éppen azt jelentik, hogy az elektrongáz átlagos sűrűsége az ortogonalizálás következtében megnőtt, hiszen az elemi cella összes, elektronoktól származó töltése

$$Z \int_{\Omega} |\psi_v|^2 d^3\mathbf{r} \cong \left( 1 + \frac{\Omega_b}{\Omega} \right) Z \quad (2.2.7)$$

A járulékos  $(\Omega_b/\Omega)Z$  töltést persze semlegesíti az ionnak egy járulékos  $\alpha Z = (\Omega_b/\Omega)Z$  töltése, ami a (2.2.1) alatti töltéssűrűségre, és az ennek megfelelő  $V_{0c}$  ortogonalizációs korrekcióra vezetett. Az

$$\alpha = \frac{\Omega_b}{\Omega} \quad (2.2.8)$$

becslés ugyan csak elég durva becslés, de az ortogonalitási korrekció amúgy is kicsiny volta következtében ez nem jelent túl nagy problémát.



b) A korrelációs korrekció megbecslésénél *Gombás* (1954) és *Callaway* (1964) nyomán abból indulhatunk ki, hogy ez leírható egy  $V_c(\mathbf{r})$  lokális potenciállal, mely a  $\varrho(\mathbf{r})$  elektronsűrűség függvényében a

$$V_{cc}(\mathbf{r}) = \mu_c(\varrho(\mathbf{r})) = \frac{d}{d\varrho}(\varrho E_c) \quad (2.2.9)$$

formulával adható meg (*Kohn és Sham*, 1965), ahol  $E_c$  az egy elektronra jutó korrelációs energia. A vezetési elektronok sűrűségterományában  $E_c$  és  $V_c$  lassan változó függvénye a  $\varrho$  sűrűségnek (lásd például *Gombás* (1961), *Pines* (1955)), míg az iontörzsön belüli nagy sűrűségek tartományában az

$$E_c \sim 0.0622 \ln(r_s) \quad (ry) \quad (2.2.10)$$

képlet szerint változik, (*Gell-Mann és Brueckner*, 1957), ahol  $r_s$  atomi egységekben az egy elektronra jutó gömbi térfogat sugara. E képletek mutatják, hogy a korrelációs potenciál egyáltalán nem additív módon adódik a törzs és vezetési elektronok sűrűségéből. Mégis a korrelációs potenciálnak az iontörzstől származó  $V_{ci}$  részét a modell potenciál már figyelembe vette, a vezetési elektronoktól származó részt a kicserélődési potenciállal együtt tárgyaljuk a következő alponban, így most csak a nem additivitásból származó

$$V_{cc} = \mu_c(\varrho_i + \varrho_v) - \mu_c(\varrho_i) - \mu_c(\varrho_v) \quad (2.2.11)$$

járulékot kell figyelembe vennünk, ahol  $\varrho_i$  és  $\varrho_v$  az iontörzs, ill. a vezetési elektronok sűrűségét jelenti, mint a hely függvényét. Mivel az iontörzsön kívül  $\varrho_i = 0$ , azért ott  $V_{cc} = 0$ , míg az iontörzsön belül

$$\mu_c(\varrho_i + \varrho_v) \approx \mu_i(\varrho_i) \quad (2.2.12)$$

és mivel a  $\mu_c(\varrho)$  függvény közel telítődik, így

$$V_{cc} = \begin{cases} -\mu_c(\varrho_v) & \text{ha } r < R_c \\ 0 & \text{ha } r \geq R_c \end{cases} \quad (2.2.13)$$

Az egy elektronra jutó  $E_c$  korrelációs energiára többféle becslés ismeretes (*Gombás*, 1961), nekünk itt nincs szükségünk  $E_c$  nagy pontosságú ismeretére, mivel a  $V_{cc}$  korrelációs korrekció amúgy is csak kicsiny járulékot jelent, melynek értékét a valenciaelektronok  $\varrho_v$  sűrűsége meghatározza.  $E_c$  számára a *Hubbard* (1958) által megadott értékeket használtuk.

c) A kicserélődési potenciálnak az iontörzstől származó részét a modellpotenciál tartalmazza. Ezért itt most csak a vezetési elektronoktól származó kicserélődést kell figyelembe vennünk, melyet a vezetési elektronok korrelációs energiájával együtt úgy számítunk, hogy nulladik közelítésben az elektrongázt egyenletes eloszlásúnak gondoljuk. Ekkor *Seitz* (1940) nyomán e potenciált

$$V_{v,ex,cor} = -1,224r_s^{-1} + \mu_c(r_s) \quad (2.2.14)$$

alakban írhatjuk. Ez a tag az  $\mathbf{r}$  helyzetvektortól nem függvény, nem ad járulékot a potenciál Fourier koefficienseihez, csupán a sáv szerkezet abszolút helyzetét befolyásolja.



Az elektron hullámfüggvényeinek a törzsfüggvényekre való ortogonalitása természetesen ismét befolyásolja a szabadnak képzelt elektrongáz sűrűségét az elektronokat követő kicserélődési és korrelációs „lyuk”-ban. A lyuk sugara rendszerint nagyobb, mint az atomi cella  $R_a$  sugara, így az iontörzsen belül a lyuk sűrűségét ugyanúgy modulálja az ortogonalizálás, mint az elektronsűrűséget, de ez lefontani igyekszik az  $a$ -ban kifejtett hatást, mivel a lyuk töltése pozitív. Ezt úgy vesszük figyelembe, hogy az  $a$ -beli  $\alpha$  paramétert még egy  $\beta$  numerikus tényezővel beszorozzuk. Minthogy a lyuk belsejében durván az elektronoknak csak fele, az antiparalel spinűek találhatók meg, a  $\beta$  szorzófaktor  $1/2$ -nek választjuk, így (2.2.8) helyett az

$$\alpha_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \frac{\Omega_b}{\Omega} = \frac{1}{2} \left( \frac{R_c}{R_a} \right)^3 \quad (2.2.15)$$

paramétert használjuk (2.2.1)—(2.2.2)-ben.

d) Hátra van még annak figyelembevétele, hogy a modellpotenciál  $A_l$  paraméterei az  $E$  energiának függvényei és a vezetési elektronok energiája más, mint a szabad ion energiái voltak, amelyekre az  $A_l$  paramétereket a 2.1. fejezetben definiáltuk.

A fémek tulajdonságok kialakításáért elsősorban azok az elektronok felelősek, amelyeknek energiája az  $E_F$  Fermi energia közelébe esik. Az  $A_l(E)$  paramétereket az  $E_F$  Fermi energiának az ionhoz viszonyított értékénél kell megkeresnünk, azaz nem az abszolút energiaskálán megadott fémbe  $\varepsilon_F$  értéknél. E két érték közötti összefüggést akarjuk először meghatározni.

A Schrödinger egyenlet a fémion közelében a

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ion}} + V_1 \right] \psi = \varepsilon \psi \quad (2.2.16)$$

alakban írható, ahol  $V_{\text{ion}}$  a tekintett ion potenciál és  $V_1$  most összefoglalja a rendszer összes többi részétől származó járulékot, azaz az összes többi ion, a vezetési elektronok járulékát, beleértve a kicserélődési és korrelációs lyukat is. Írjuk (2.2.16)-ot az

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ion}} \right] \psi = (\varepsilon - V_1) \psi \quad (2.2.17)$$

formában, amit összevetve (2.1.1)-gyel, látható, hogy az ionhoz viszonyított  $E$  energiák és a fémbe  $\varepsilon$ , abszolút skálán mért energiák közötti kapcsolat

$$E = \varepsilon - V_1 \quad (2.2.18)$$

Ugyanez érvényes természetesen az  $\varepsilon_F$  és  $E_F$  Fermi energiákra nézve is. Szigorúan a  $V_1$  nem állandó, de választhatjuk egy alkalmasan súlyozott átlagát az  $R_M$  modell-rádiuson belül, mivel  $A_l$  amúgy is lassan változó függvénye az  $E$ -nek (lásd 2.2. ábrát és II-t), és  $V_1$ -nek az  $R_M$  sugáron kívüli változása teljesen jelentéktelen az  $A_l(E)$  együtthatók szempontjából.

Az  $\varepsilon_F$  Fermi energia még nem ismert, ez a teljes sávstruktúra számítások egyik eredménye lesz. Az elektrongázt szabadnak tekintve a sáv abszolút helyzete, benne az  $\varepsilon_F$  Fermi energiáé a kohéziós energia segítségével becsülhető meg (Seitz, 1940).  $\varepsilon_F$  és az átlagos  $V_1$  ismeretében  $E_F$  megadható (lásd IV-ben). Egyébként mint ismer-



retes (Wigner és Seitz, 1955),  $E_F$  jó közelítéssel a szabad atom legalacsonyabb valencianívójával egyezik meg.

Összefoglalóan az előző fejezetben (2.1.11)–(2.2.13) alatt megadott  $V_M$  modell potenciál az elektronzselé hatására a következőképpen módosult:

$$V_{\text{ion}} = V_M + V_{0c} + V_{cc} \quad (2.2.19)$$

Figyelembe veendő, hogy a  $V_M$ -ben szereplő  $A_l(E)$  együtthatókat a (2.2.18)-ból számított  $E_F$  energiákon kell számítani, és a  $V_{0c}$  ortogonalitási korrekció a (2.2.1); (2.2.2); (2.2.15), a  $V_{cc}$  korrelációs korrekció a (2.2.13) képletből számítandó. A  $V_{\text{ion}}$  potenciál nem lokális, mert az  $A_l$  együtthatókon keresztül függ a tekintetbe vett állapottól is.

### 2.3. Az elektrongáz leárnýékoló hatása

Mind ez ideig a fém valencia elektronjait úgy tekintettük, hogy állapotuk nem változott ahhoz képest, mintha szabad gázt alkotnának. Szemléletesen azt mondhatjuk, hogy az előzőekben emlegetett elektron zselét most engedjük „megolvadni”, az elektronokat engedjük „mozogni”, állapotukat változtatni, ami az előbbieken nyert  $V_{\text{ion}}$  potenciál további változását, leárnýékolását eredményezi.

Ezt a szemléletes képet a következőképpen tudjuk pontosan megfogalmazni. Nulladik közelítésben az elemi cella vezetési elektronjai konstans potenciáltérben mozognak, ami ekvivalens azzal, hogy az elektrongázt szabadnak tekintjük. Egyrészesce közelítésben ezen elektronokra érvényes a Hartree—Fock-egyenlet a következő alakban:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + e^2 \sum_l n(l) \int \psi_l^*(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \psi_l(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \right] \psi_k(\mathbf{r}) - e^2 \sum_l n(l) \psi_l(\mathbf{r}) \int \psi_l^*(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \psi_k(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \varepsilon(\mathbf{k}) \psi_k(\mathbf{r}) \quad (2.3.1)$$

Itt  $\psi_k(\mathbf{r})$  az elektronok Bloch-függvénye, konkrétan most egyszerű síkhullám a  $\mathbf{k}$  hullámszámvektorral,  $n(l)$  az  $l$  állapot betöltési száma:

$$n(l) = \begin{cases} 1 & \text{ha } |l| \leq k_{F_0} \\ 0 & \text{ha } |l| > k_{F_0} \end{cases} \quad (2.3.2)$$

ahol  $k_{F_0}$  a Fermi-gömb sugara. A (2.3.1) egyenlet baloldalán az első integrál nyilván az elektron Coulomb- a második a kicserélődési energiáját jelenti. (E fejezet elején átmenetileg az általános tárgyalásban elhagyjuk az atomi egységrendszert.)

Ha most képzeletben beletesszük az elemi cellába a pozitív töltésű iont, mely az előbbi fejezetben megadott  $V_{\text{ion}}$  potenciállal rendelkezik, akkor a rendszer változása nem csak annyi, hogy (2.3.1) baloldalára beírandó még a  $V_{\text{ion}}$  az elektron potenciális energiája az ion Coulomb terében, hanem állapotfüggvénye, a  $\psi_k$  Bloch-függvény is megváltozik, létrejön az elektrongáz egy megváltozott eloszlása. Ehhez a megváltozott eloszláshoz azonban új Coulomb és kicserélődési energiák tartoznak, melyek self-consistent módon vannak meghatározva éppen az új, megváltozott állapotfüggvényekkel. Azon, hogy az elektron zselét engedjük megolvadni pontosab-



ban azt értjük, hogy a vezetési elektronok ezen új potenciális energiáját self-consistent módon akarjuk meghatározni.

Gyakorlatilag a számításokat csak első közelítésig végezzük. Mivel a rendszerbe bevitt  $V_{\text{ion}}$  potenciál még az iontörzs belsejében sem jelent erős perturbációt, feltelezhetjük, hogy az elsőrendű közelítés nem ad rossz eredményeket. Legyen  $\Phi_k$  az új hullámfüggvény és írjuk ezt a

$$\Phi_k = \psi_k + \delta\psi_k \quad (2.3.3)$$

alakban. Ezzel az új Hartree—Fock-egyenletek:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ion}} + e^2 \sum_l n(l) \int \Phi_l^*(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \Phi_l(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}' \right] \Phi_k(\mathbf{r}) - e^2 \sum_l n(l) \Phi_l(\mathbf{r}) \int \Phi_l^*(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \Phi_k(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) \Phi_k(\mathbf{r}) \quad (2.3.4)$$

Ha  $\Phi_1$ -nek előző (2.3.3)-beli alakját ide behelyettesítjük és a  $\delta\psi_1$ -ben csak elsőrendű tagokat tartjuk meg, akkor egy olyan új Hartree—Fock egyenletet kapunk, amely az elektronok eredeti (2.3.1) egyenletétől egy  $U$  potenciálban különbözik. Ezen  $U$  potenciál hatása bármilyen  $f(\mathbf{r})$  függvényre a következő:

$$Uf(\mathbf{r}) = [V_{\text{ion}} + e^2 \sum_l n(l) \int \{\psi_1^*(\mathbf{r}') \delta\psi_1(\mathbf{r}') + \psi_1(\mathbf{r}') \delta\psi_1^*(\mathbf{r}')\} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} d^3\mathbf{r}'] f(\mathbf{r}) - e^2 \sum_l n(l) \int \{\psi_1^*(\mathbf{r}') \delta\psi_1(\mathbf{r}) + \psi_1(\mathbf{r}) \delta\psi_1^*(\mathbf{r}')\} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} f(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (2.3.5)$$

Az  $U$  self-consistent voltát úgy akarjuk biztosítani, hogy a  $\delta\psi_1$ -re előírjuk, hogy ugyanezen  $U$ -ból az elsőrendű perturbációs számításnak megfelelően a

$$\delta\psi_1(\mathbf{r}) = \sum_m \frac{\langle \psi_m | U | \psi_1 \rangle}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \psi_m(\mathbf{r}) \quad (2.3.6)$$

formulával legyen meghatározható. Behelyettesítve ezt előző (2.3.5) egyenletünkbe az  $U(\mathbf{r})$  potenciálra egy integrálegyenletet nyerünk:

$$Uf(\mathbf{r}) = \left\{ V_{\text{ion}} + e^2 \sum_{l,m} [n(l) - n(m)] \frac{\langle \psi_m | U | \psi_1 \rangle}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \int \psi_1^*(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \psi_m(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \right\} f(\mathbf{r}) - e^2 \sum_{l,m} [n(l) - n(m)] \frac{\langle \psi_m | U | \psi_1 \rangle}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \int \psi_1^*(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} f(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \psi_m(\mathbf{r}). \quad (2.3.7)$$

Legyen  $f(\mathbf{r}) = \psi_k(\mathbf{r})$ , és  $\psi_k^*(\mathbf{r})$ -rel szorozva, integrálva kapjuk:

$$\langle \psi_k | U | \psi_k \rangle = \langle \psi_k | V_{\text{ion}} | \psi_k \rangle + \sum_{l,m} [n(l) - n(m)] \frac{\langle \psi_m | U | \psi_1 \rangle}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} [v(\mathbf{k}' \mathbf{l} \mathbf{m} \mathbf{k}) - v(\mathbf{k}' \mathbf{l} \mathbf{k} \mathbf{m})] \quad (2.3.8)$$



ahol

$$v(\mathbf{k}'\mathbf{l}\mathbf{m}\mathbf{k}) = e^2 \iint \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'$$

$$v(\mathbf{k}'\mathbf{l}\mathbf{k}\mathbf{m}) = e^2 \iint \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \quad (2.3.9)$$

Az elektronok közötti  $e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$  Coulomb kölcsönhatás e Fourier együtthatóira Hubbard (1957, 1958) és Sham (1963) számításai nyomán érvényes

$$v(\mathbf{k}'\mathbf{l}\mathbf{m}\mathbf{k}) = 4\pi e^2 / \Omega q^2$$

$$v(\mathbf{k}'\mathbf{l}\mathbf{k}\mathbf{m}) = \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} f(q), \quad f(q) = \frac{q^2}{2(q^2 + k_{F0}^2 + k_s^2)} \quad (2.3.10)$$

ahol  $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$  és  $k_s$  a leárrnyékolt kicserélődési kölcsönhatás leárrnyékolási tényezője, melyre a

$$k_s^2 = 2k_{F0}/\pi = \frac{1}{2} (k_s^2)_{\text{Thomas-Fermi}} \quad (2.3.11)$$

kifejezést használtuk, mely egy elfogadható becslés a Thomas—Fermi és Bohm—Pines által megadott értékek között. Ezzel

$$\langle \psi_{\mathbf{k}'} | U | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \psi_{\mathbf{k}'} | V_{\text{ion}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} (1-f(q)) \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \frac{n(\mathbf{l}) - n(\mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \quad (2.3.12)$$

Feladatunk ezen egyenletrendszerből az  $U$  matrixelemeinek meghatározása. Mivel a  $V_{\text{ion}}$  potenciál nem lokális,  $\mathbf{k}$ -tól függő részt is tartalmaz, ezért egyelőre általánosan feltételezzük, hogy ha  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ , akkor

$$\langle \psi_{\mathbf{k}'} | V_{\text{ion}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = V(\mathbf{q}) + F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (2.3.13)$$

Amennyiben a  $V_{\text{ion}}$  potenciál lokális lenne, úgy  $F \equiv 0$ . Természetes, hogy az  $U$  potenciál sem lesz lokális, és írjuk ezért

$$\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle = A(\mathbf{q}) + B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (2.3.14)$$

alakban. Behelyettesítve e két utóbbi kifejezést (2.3.12)-be, első közelítésben elhagyva  $\langle \psi_{\mathbf{l}} | U | \psi_{\mathbf{m}} \rangle$  „nem diagonális” elemeit, vagyis azokat, melyekre  $|\mathbf{l} - \mathbf{m}| \neq q$ , kapjuk

$$A(\mathbf{q}) + B(\mathbf{k}' \mathbf{k}) = V(\mathbf{q}) + F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) +$$

$$+ \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} [1-f(q)] \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{m} \\ |\mathbf{l}-\mathbf{m}|=q}} \frac{n(\mathbf{l}) - n(\mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} A(\mathbf{q}) +$$

$$+ \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} [1-f(q)] \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{m} \\ |\mathbf{l}-\mathbf{m}|=q}} \frac{n(\mathbf{l}) B(\mathbf{m}, \mathbf{l}) - n(\mathbf{m}) B^*(\mathbf{l}, \mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \quad (2.3.15)$$



Minthogy ezen egyenletnek minden  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  pontban teljesülnie kell, azért egyrészt

$$B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (2.3.16)$$

másrészt

$$\begin{aligned} A(\mathbf{q}) \left\{ 1 - \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} [1 - f(q)] \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{m} \\ |\mathbf{l} - \mathbf{m}| = q}} \frac{n(\mathbf{l}) - n(\mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \right\} = \\ = V(q) + \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} [1 - f(q)] \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{m} \\ |\mathbf{l} - \mathbf{m}| = q}} \frac{n(\mathbf{l}) B(\mathbf{m}, \mathbf{l}) - n(\mathbf{m}) B^*(\mathbf{l}, \mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

Ebből

$$A(q) = \frac{V(q)}{\varepsilon_q} + I(F) \quad (2.3.18)$$

ahol

$$\varepsilon_q = 1 - \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} [1 - f(q)] \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{m} \\ |\mathbf{l} - \mathbf{m}| = q}} \frac{n(\mathbf{l}) - n(\mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \quad (2.3.19)$$

$$I(F) = \left\{ \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} [1 - f(q)] \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{m} \\ |\mathbf{l} - \mathbf{m}| = q}} \frac{n(\mathbf{l}) F(\mathbf{m}, \mathbf{l}) - n(\mathbf{m}) F^*(\mathbf{l}, \mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} \right\} / \varepsilon_q \quad (2.3.20)$$

Végül az  $U$  potenciál keresett mátrixelemei:

$$\langle \psi_{\mathbf{k}'} | U | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{V(q)}{\varepsilon_q} + F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + I(F) \quad (2.3.21)$$

Eredményünket úgy értelmezzük, hogy az elektrongáz leárnýékoló hatása következtében az elemi cella belsejében az eredeti  $V_{\text{ion}}$  potenciál helyett (1.6.2) mintájára az

$$U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \langle \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} | U | \psi_{\mathbf{k}} \rangle S(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{V(q)}{\varepsilon_q} + F(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) + I(F) \right] S(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (2.3.22)$$

a  $\mathbf{k}$  állapottól is függő, nem lokális potenciál hat.

Ha az eredeti  $V_{\text{ion}}$  potenciálunk lokális lenne, azaz  $F=0$  lenne, akkor eredményünk szemléletesen azt mondja, hogy a leárnýékolás hatása ekvivalens egy  $q$ -tól függő  $\varepsilon_q$  dielektromos állandó bevezetésével, mely a lokális potenciál  $V(q)$  Fourier-komponensei helyett a leárnýékolt  $V(q)/\varepsilon_q$  értékek használatát jelenti a potenciál Fourier-sorában. Nem lokális potenciál esetében a helyzet bonyolultabb, mert fellépnek a  $\mathbf{k}$ -tól, az elektron állapotától függő  $F(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$  és  $I(F)$  további tagok is. Egyébként megmutatható, (III) hogy a nem-lokalitás főképp a  $q \sim 2k_F$  Fourier-komponensek esetében jelent nem elhanyagolható hatást a (2.3.22) Fourier-sorban.

Specializáljuk most már tárgyalásunkat az ion potenciál (2.2.19) konkrét alakjára. Visszatérve ismét atomi egységekre írjuk a  $V_M$  modell potenciált (2.1.11)—(2.1.13) egyenleteknek és az  $A_l$  ( $l \geq 2$ ) együtthatókra vonatkozó feltevésnek megfelelően a

$$V_M = \begin{cases} -A_2 - (A_0 - A_2)P_0 - (A_1 - A_2)P_1, & \text{ha } r < R_M \\ -Z/r & \text{ha } r \geq R_M \end{cases} \quad (2.2.23)$$



alakba (N. b.  $\sum_l P_l = I$ ). Minthogy a  $V_{0c}$  és  $V_{cc}$  korrekciók lokálisak, azért

$$V_{\text{ion,lokális}} = \begin{cases} -A_2 + V_{0c} + V_{cc} & \text{ha } r \leq R_M \\ -Z/r + V_{0c} + V_{cc} & \text{ha } r > R_M \end{cases} \quad (2.3.24)$$

és

$$V_{\text{ion,nem lokális}} = \begin{cases} -(A_0 - A_2)P_0 - (A_1 - A_2)P_1 & \text{ha } r < R_M \\ 0 & \text{ha } r \geq R_M \end{cases} \quad (2.3.25)$$

A  $V_{\text{ion}}$  Fourier-koefficiensének lokális része tehát egyszerű számolással (lásd  $B$  függelék)

$$\begin{aligned} V(q) = & -\frac{8\pi A_2}{\Omega q^3} [\sin(qR_M) - qR_M \cos(qR_M)] - \frac{8\pi Z}{\Omega q^2} \cos(qR_M) + \\ & + \left[ \frac{4\pi |\mu_c(q_v)|}{\Omega q^3} - \frac{24\pi Z \alpha_{\text{eff}}}{\Omega q^2 (qR_c)^3} \right] [\sin(qR_c) - qR_c \cos(qR_c)] \end{aligned} \quad (2.3.26)$$

Hasonlóan a nem lokális rész  $F(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  függvényére:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = & -\frac{8\pi}{\Omega} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \Theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'})(A_l - A_2) \frac{R_M^2}{k^2 - k'^2} \times \\ & \times [kj_{l+1}(x)j_l(x') - k'j_{l+1}(x')j_l(x)]_{\substack{x=kR_M \\ x'=k'R_M}} \end{aligned} \quad (2.3.27)$$

Az  $\varepsilon_q$  és  $I(F)$  kifejezéseiben szereplő  $m$ -re történő összegzés a szokásos módon a reciproktérbeli integrálokká alakítható át. A számításokat ismét a  $B$  függelékben részleteztük, itt csak az eredményt közöljük:

$$\varepsilon_q = 1 - \frac{4\pi}{\Omega q^2} \frac{(1 + \alpha_{\text{eff}})Z}{2 \varepsilon_{F_0}} [1 - f(q)] \left[ \frac{1}{2} + \frac{4k_{F_0}^2 - q^2}{8qk_{F_0}^2} \ln \left| \frac{2k_{F_0} + q}{2k_{F_0} - q} \right| \right] \quad (2.3.28)$$

$$I(F) \equiv I(q) = -\frac{32(1-f(q))}{\pi \Omega q^2 \varepsilon_q} [(A_0 - A_2)L_0 + 3(A_1 - A_2)L_1] R_M^2 \quad (2.3.29)$$

$$L_l = \int_{\kappa < k_{F_0}} (\kappa^2 - \kappa'^2) [\kappa j_{l+1}(x)j_l(x') - \kappa' j_{l+1}(x')j_l(x)]_{\substack{x=\kappa R_M \\ x'=\kappa' R_M}} P_l(\cos \Theta_{\kappa\kappa'}) d^3\kappa \quad (2.3.30)$$

ahol  $\kappa' = \kappa + \mathbf{q}$ . Sajnos, az  $L_l$  kifejezésbeli integrálok csak numerikusan kezelhetők és még tekintettel kell lenni arra is, hogy az integrálnak a  $\kappa = \kappa'$  helyen szingularitása van (lásd  $B$  függelék).

Összefoglalva megjegyezzük, hogy a 2. fejezet elején tervezett három lépés végrehajtása után a (2.3.21)—(2.3.22) a (2.3.26)—(2.3.30) képletek, a bennük szereplő paraméterek 2.2. táblázatbeli értékeivel szolgáltatják a leárnýékolt modell potenciál (továbbiakban: LMP) teljes kifejezését. A LMP Fourier koefficiensai tulajdonképpen igen egyszerű analitikus függvények és egyedül az  $L_l$  integrálok kiszámítása jelent fáradságos numerikus munkát.



## 2.2. TÁBLÁZAT

Név	Dimenziója	Jelölése	Ca	Sr	Ba
Rácsparaméter	atomi egys.	$a$	10,5	11,5	11,9
Atomi térfogat	atomi egys.	$\Omega$	293,5	380,2	424,1
Reciprok rácsparaméter	atomi egys.	$2\pi/a$	0,5955	0,5464	0,5280
A modell potenciál paraméterei	atomi egys.	$A_0$	0,57	0,53	0,47
	atomi egys.	$A_1$	0,61	0,54	0,41
	atomi egys.	$A_2$	0,92	0,88	0,99
Modell rádiusz	atomi egys.	$R_M$	3,6	3,6	3,6
Valencia szám		$Z$	2	2	2
Elektron effektív tömeg	a szabad elektron				
	elektron	$m^*$	1,0	1,0	1,0
	tömegegys.				
A fém ion sugara	atomi egys.	$R_c$	2,00	2,40	2,70
Az ortogonalitási korrekció paramétere	atomi egys.	$\alpha_{eff}$	0,057	0,076	0,097
A korrelációs korrekció paramétere	rydberg	$ \mu_c(q_v) $	0,078	0,075	0,074
Szabad elektron Fermi energia	rydberg	$\varepsilon_{F0}$	0,3440	0,2895	0,2691
Fermi momentum	atomi egys.	$k_{F0}$	0,5865	0,5380	0,5188

A Ca, Sr és Ba fémek néhány geometriai adata, a modell potenciál paraméterei, a szabad elektron Fermi nivó és a szabad elektron Fermi-gömb sugara.

## 2.4. A leárnnyékolt modell potenciál a kalcium fém esetében

Az előző fejezetekben a LMP általános alakjával foglalkoztunk. A 2.2. táblázatban megadott paraméterek segítségével az általános eredmény néhány tulajdonságát akarjuk most megvizsgálni. Legfőbb eldöntendő kérdésünk: alkalmas-e a LMP arra, hogy egy egyszerű pszeudopotenciálnak tekintve első két Fourier-koefficiensével, az  $U_{111}$  és  $U_{200}$  paraméterekkel jellemezzük a Ca energiaspektrumát az (1.6.8)–(1.6.11) képleteknek megfelelő módon. Ehhez mindenképp előt az kell eldönteni, hogy mennyire tekinthetők az  $U_{111}$  és  $U_{200}$  paraméterek, általában a  $\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | U | \mathbf{k} \rangle$

## 2.3. TÁBLÁZAT

$q/2k_{F0}$	0,8	0,9	1,0	1,1
$F(\mathbf{k}', \mathbf{k})$	0,1358	0,0704	−0,0026	−0,0838
$V(q)$	−0,1017	−0,0387	0,0047	0,0321
$V_{oc}(q)$	−0,0076	−0,0054	−0,0039	−0,0028
$V_{cor}(q)$	0,0061	0,0055	0,0049	0,0042
$V_{ion}(q)/\varepsilon(q)$	−0,0695	−0,0291	0,0048	0,0297
$I(F)$	−0,0381	−0,0166	−0,0042	0,0001
$\langle \mathbf{k}'   U   \mathbf{k} \rangle$	0,0279	0,0242	−0,0020	−0,0507

A leárnnyékolt modell potenciál  $\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle$  mátrixelemei és összetevői a szabad elektron Fermi-felületen, azaz  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k_{F0} = 0,5865$  at. e. A  $\mathbf{k}$  és  $\mathbf{k}'$  vektorok irányára vonatkozóan csak a  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  megkötés érvényes, ahol  $|\mathbf{q}| = q$  különböző értékeinek függvényében szerepelnek a táblázatban megadott mennyiségek. Valamennyi érték rydbergben van adva,  $k_{F0}$  a szabad elektron Fermi-gömb sugara.



mátrixelemek a BZ különböző pontjaiban állandóknak, azaz milyen mértékben lokális a LMP a Ca esetében.

A 2.3. táblázatban megadtuk a  $\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle$  mátrixelemeket úgy, hogy  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k_{F_0}$ , azaz a szabad elektron Fermi-gömbön véve a  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  hullámszámvektorokat. A táblázat egyben tartalmazza a mátrixelemek egyes összetevőit is, amelyből megállapítható, hogy az ortogonalitási és korrelációs korrekciók bár kicsinyek, de nem elhanyagolhatók. Ugyancsak jelentős a nem lokalitást jelentő  $F(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  értéke, ami már itt is arra utal, hogy a  $U_{111}, U_{200}$  paraméterek aligha lesznek  $\mathbf{k}$ -tól függetlenek.

Ugyanígy a 3.1.—3.4. táblázatok is, melyekről részletesebben majd a következő fejezetben lesz szó, mutatják, hogy a LMP erősen nem lokális, legalább is a Ca esetén. Ezért nincs remény arra, hogy az 1.6. fejezetben megtárgyalt egyszerű pszeudopotenciál approximáció alkalmazható lenne.

*A dolgozat második, befejező része, mely a Függelék és az irodalmi hivatkozásokat tartalmazza a Magyar Fizikai Folyóirat 1970. 4. számában jelenik meg.*

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1970. I. 17. — Terjedelem: 7,05 (A/5) ív

70-254 — Szegedi Nyomda

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181 útján eszközölhetők.)



Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26,491
---------------

## TARTALOMJEGYZÉK

oldal

<i>Balázs Erzsébet és Kisdi Dávid: Nukleonok effektív kölcsönhatása végtelen maganyagban . . . . .</i>	197
<i>M. J. Moravcsik: Két szabad nukleon kölcsönhatása . . . . .</i>	229
<i>Vasvári Béla: A kalcium, stroncium és bárium elektronszerkezete . . . . .</i>	249



307.226 W

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

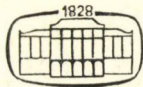
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XVIII. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1970



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó Budapest V., Alkotmány utca 21., pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43 790 057 181 útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# AZ ABSZORPCIÓ HATÁSA RÁCSHIBÁK TRANZMISSZIÓS ELEKTRONMIKROSKÓPOS KÉPINTENZITÁSÁRA\*

SCHULZE DIETRICH

Német Tudományos Akadémia, Szilárdtestfizikai és Anyagkutatási Központi Kutató Intézet,  
Fémfizikai és Tisztafém Intézet, Drezda, NDK.

## 1. Bevezetés

Az elektronmikroszkópia kezdeti korszakától ismételten és különböző szempontok szerint vizsgálták az elektronsugárzás kölcsönhatását a tárgy atommagjaival és elektronjaival. A cél mindenkor az volt, hogy az elektronszórási folyamatok ismeretében a kép intenzitáseloszlására lehessen következtetni. Ez lehetővé teszi az észlelt kontrasztok értelmezését.

*Amorf preparátumok* esetében a preparátum tömegvastagságának (vastagság, illetőleg sűrűség ingadozásának vagy mindkettőnek) a hatását kell értelmezni. Ilyen esetekben a rugalmas (atommagon való koherens) és rugalmatlan (elektronokon való inkoherens) szórás közti különbségtétel nyilvánvalóan elegendő.

*Kristályos preparátumok* struktúráinak leképzése a periodikus rácsszerkezeten végbemenő interferenciafolyamatok eredménye. A kristályból kilépő elektronsugarak intenzitáseloszlását az elhajlási elmélet írja le. A koherens és inkoherens szórás közti egyszerű különbségtétel ebben az esetben már nem kielégítő. Így bebizonyosodott, hogy a rugalmas szórás mellett a rugalmatlan szórási folyamatok is igen jelentékeny befolyást gyakorolhatnak a kép keletkezésére. Ezt Kamiya és Uyeda [1] hatásos kísérletei is igazolják. Kísérleteik problémafeltevéseit az 1. ábra mutatja:

1. Az 1 helyzetben az apertúrablende Bragg-reflexióra centrált. A kép kialakításához rugalmas (fekete gyűrű) és rugalmatlanul szórt elektronok (sraffozott gyűrű) egyaránt hozzájárulnak.

2. A 2 helyzetben az apertúrablende a Bragg-reflexió mellett a diffúz intenzitás helyzetére állított (sraffozott szakasz). Ebben az esetben csupán a rugalmatlanul szórt elektronok hoznak létre képet, ennek intenzitása ugyan gyengébb, de a kép az 1 esettel kvalitatíve és kvantitatíve analóg.

Az elhajlási elmélet szerint a rugalmatlanul szórt elektronok okozta hatások kapcsán három effektust kell tárgyalni:

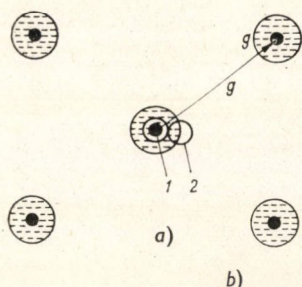
1. Az elektronhéj vegyértékelektronjainak vagy erősebben kötött elektronjainak *egyszeres gerjesztésének* esete. Ebben az esetben egyaránt figyelhető meg erős és gyenge kölcsönhatás. A nagy szögben szórt elektronokat az apertúrablende elfogja, így ezek a képalkotáshoz nem járulnak hozzá. A kis szögben szórt elektronok viszont keresztüljutnak az apertúra-blendén és hozzájárulnak a kép kontrasztjához.

2. *A vezetési elektronok plazma-gerjesztése* (elektronplazma). Ebben az esetben az elektronsugár kis szögben szóródik, így a szórt elektronok a képkontrasztához hozzájárulnak.

3. *Fononszóródás*: Kölcsönhatás a rácsrezgésekkel. Az elektronnyaláb egyaránt szóródik kis és nagy szögben. A kisszögű szórás ebben az esetben mint háttér jelentkezik.

\* Ér. 1969. IX. 1.



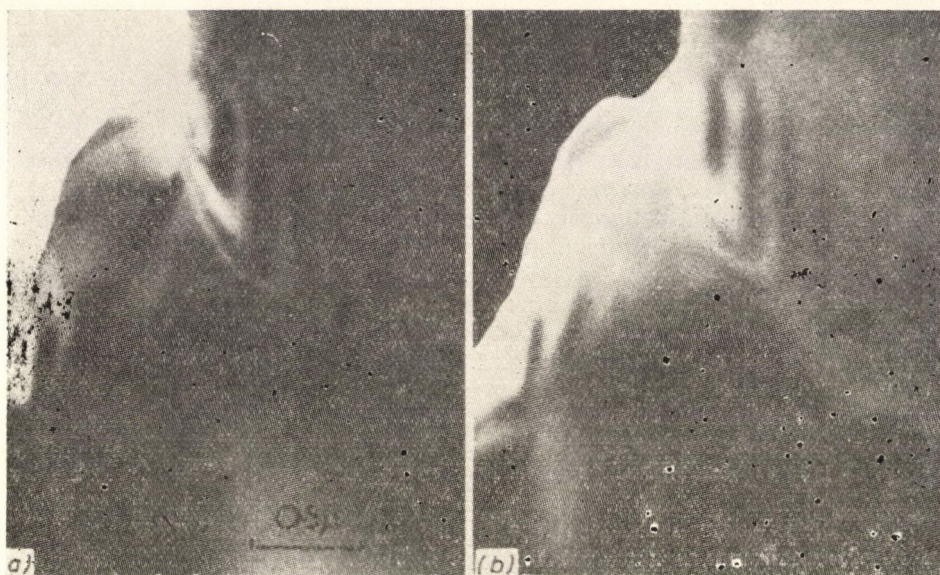


1. ábra. Kamiya és Uyeda [1] kísérleteihez

a) Appertúrablende 1 helyzetben a Bragg-reflexióhoz koncentrikus, 2 helyzetben a diffúz intenzitások tartományában

b) Az appertúrablende 1 helyzetének megfelelő elektronmikroszkópos kép

c) Az appertúrablende 2 helyzetének megfelelő elektronmikroszkópos kép hajlítási kontúrok nikkelen, Hirsch és munkatársai nyomán [9]



Összefoglalólag ezt lehet mondani: az elektronnyaláb kölcsönhatása a tárgy fononjaival és elektronjaival energiavesztéssel jár. Az elektronhullámoknak a kristályban végbemenő abszorpcióját rugalmatlan szórás folyamatok idézik elő. Az abszorpciós spektrum szélességének növekedésével a kromatikus hiba nő, ez a feloldást kedvezőtlenül befolyásolja, (ezzel a hatással dolgozatunk nem foglalkozik). Az abszorpció adott interferenciafolyamatok intenzitásaira és profiljaira gyakorol hatást, ezért nem hanyagolható el. A rácshibáktól származó intenzitáseloszlás egyáltalán csak az abszorpciós folyamatok tekintetbevételével érthető meg.

## 2. Abszorpciós paraméter

Az elektronelhajlás elmélete az abszorpciót egy komplex rácspotenciál bevezetésével veszi figyelembe (Molière, [2]). A kvantummechanikai tárgyalás Yoshioka-tól származik [3] arra az esetre, amikor a rugalmatlan szórás a rugalmas szórás hányadához képest kicsiny.



Az elmélet az abszorpciót első közelítésben elhanyagolja és a Schrödinger-egyenlet megoldására egy valós  $V_g$  együtthatókkal felírt, periodikus rácpotenciált vezet be:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_g V_g \exp 2\pi i \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}, \quad (1)$$

ahol  $\mathbf{r}$  a reflektáló rácssík helyvektora és  $\mathbf{g}$  a reciprok rácsvektor.

A továbbiakban az elmélet az abszorpciót azáltal veszi figyelembe, hogy a  $V(r)$  potenciálhoz egy kicsiny periodikus, valós együtthatókkal felírt  $V'(r)$  potenciál  $i$ -szeresét adja hozzá. Ily módon egy komplex együtthatójú rácpotenciálhoz jutunk:

$$V(\mathbf{r}) + i \cdot V'(\mathbf{r}) = \sum_g (V_g + iV'_g) \exp 2\pi i \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}, \quad (2)$$

ahol  $V'(r)$  — abszorpcióspotenciál, és  $V_g$ , valamint  $V'_g$   $g$ -ed rendű Fourier-együtthatók.

A szórási amplitúdók  $V'_g/V_g$  dimenzió nélküli hányadosa (az ún. „szórási viszony”) a rugalmatlan szórásnak a rugalmas szóródáshoz viszonyított hatását fejezi ki. Ezért ez a viszonyszám az abszorpció mértéke. Nem nagyon nagy energiájú elektronok ( $< 200$  eV) esetében a szórási viszonyt így írjuk fel:

$$V'_g/V_g = \xi_g/\xi'_g$$

ahol  $\xi_g$  az extinkciós hossz és  $\xi'_g$  az anomális abszorpció hossz. A közepes abszorpció mértéke továbbá az alábbi paraméterrel adható meg:

$$V'_g/V_g = \xi_g/\xi'_0$$

ahol  $\xi'_0$  a közepes abszorpció hosszát jelenti.

Egyes elektronmikroszkópos leképzési esetekre (ékinterferenciák, hajlítási kontúrok, rétegződési hibák) számolt intenzitásprofiloknak elektronmikroszkópos felvételekkel való összehasonlításából Hashimoto, továbbá Howie és Whelan [4] arra a következtetésre jutottak, hogy a szórási viszony fémekre első közelítésben a felhasznált  $g$  reflexiótól függetlenül

$$\xi_g/\xi'_g \approx 0,1$$

Ténylegesen azonban  $V'_g/V_g$  a vizsgált kristály szerkezetével, a hőmérséklettel és  $g$ -vel változik. Ez a körülmény a számított kontrasztértékeket érzékenyen befolyásolja, miként ezt Humphreys és Hirsch [5], az abszorpció paramétereinek az elhajlási elméletben való szigorúbb számbavételével megállapították.

### 3. Terminológiai megjegyzések, szemléletesség tétele

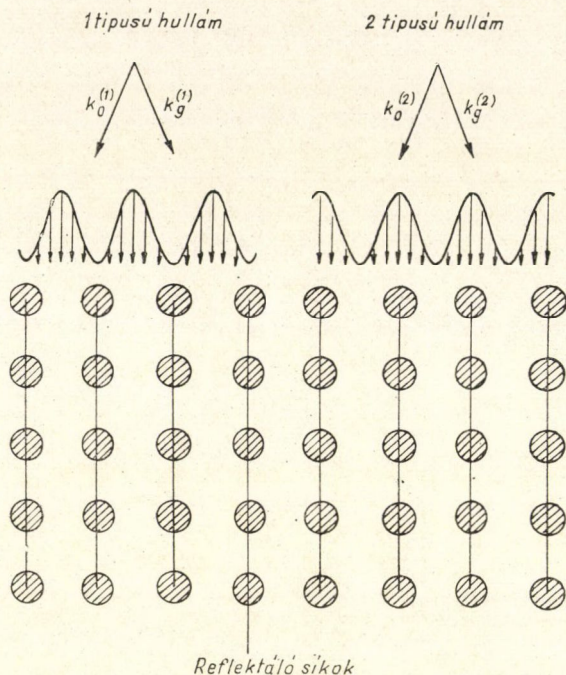
1. Az elektronelhajlás dinamikus elméletében az exakt Bragg-helyzettől való eltérést, az ún. elhajlási eltérést (elhajlási hiba) az alábbi dimenzió nélküli mennyiséggel szokás megadni.

$$x = \xi_g \cdot s, \quad (3)$$

ahol  $s$  a reciprok rácsponttól való eltérés vektorát jelöli.



2. A Bragg-reflexió feltételei mellett, illetőleg, ha a Bragg-reflexiótól való eltérés nem nagyon nagy, a kristályban egymástól függetlenül két hullámtér ( $k_0^1, k_g^1$ ) és ( $k_0^2, k_g^2$ ) alakul ki. Ezt a két hullámteret a következőkben 1-, illetőleg 2-típusú hullámnak nevezzük (2. ábra). Ez a két hullámtér a diszperziós felület két-két ágához van hozzárendelve (vö. például Hashimoto, Howie és Whelan [4] szemléletes tárgyalását). Összefüggéseinkben a 0-index az átengedett, a g-index pedig a reflektált hullámra vonatkozik. A  $k_0^1$  és  $k_g^1$  közti interferencia olyan hullámteret hoz létre, melynek rezgési maximumai az atomsorok között helyezkednek el (2. ábra, bal oldal), ez az 1-típusú hullám. A 2-típusú hullám esetében viszont a maximumok az atomsorokra esnek (2. ábra, jobb oldal). Már ebből a tényből is szemléletesen következik, hogy a 2-típusú hullám erősebben abszorbeálódik, mint az 1-típusú.



2. ábra. A két hullámtér köbös primitív rácsban reflexiós helyzetben. 1-típusú hullám (balról), 2-típusú hullám (jobbról)

(Hashimoto, Howie és Whelan munkája alapján [4])

#### 4. Humphreys és Hirsch abszorpcióssparaméter elmélete [5]

Az abszorpció elméleti vizsgálata arra irányult, hogy az egyes anyagok  $T$  hőmérséklettől és az alkalmazott  $g$  reflexiótól

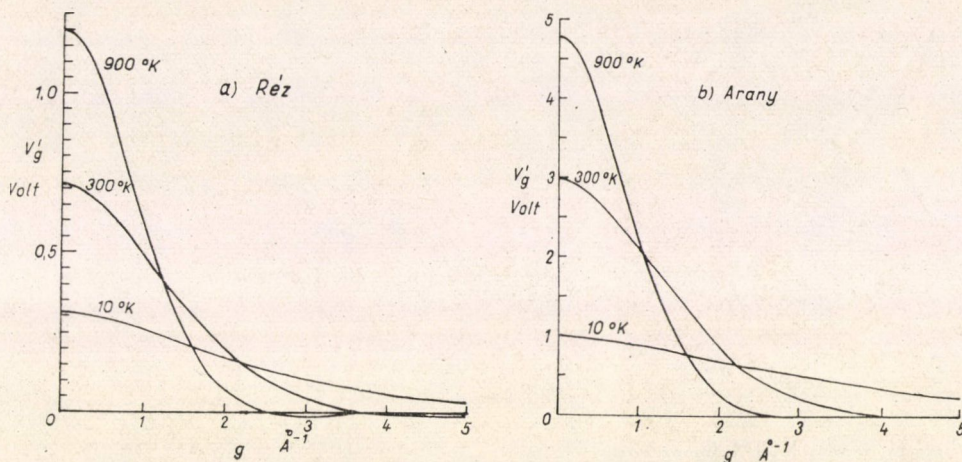
függő  $V_g'/V_g$  szórási viszonyára exaktabb értékeket vezessen le. A  $T=0^\circ\text{K}$ -hoz tartozó  $V_g$  értékeket az atomszórásai amplitúdók Born-féle közelítéséből számították ki, a termikus rácsrezgésekkel korrigált  $V_g(T)$  értéket az így meghatározott  $V_g$ -ből Debye—Waller-faktorok segítségével határozták meg. A  $V_g'(T)$  hőmérséklet függő változása Hall és Hirsch szerint [6] a lineáris oszcillátorok Einstein-féle kvantálása segítségével határozható meg.

Az elméleti megfontolások egyik eredményét, ti. a  $V_g'$  abszorpciós potenciálnak a  $g$  reflexiótól való függését, a 3. ábra mutatja. Az ábra a  $V_g'$  értékeket tartalmazza réz és arany esetére  $T=10^\circ, 300^\circ$  és  $900^\circ\text{K}$  hőmérsékleteken 100 keV energiára.  $V_g'$  értéke  $g \approx 0,1\text{\AA}^{-1}$ -ig először gyengén, majd erőteljesebben csökken. Bizonyos  $g$  értékekre ( $g > 2,5\text{\AA}^{-1}$ )  $V_g'$  negatív lesz, nagy  $g$  értékek esetén a  $V_g'(g)$  függvény 0-hoz tart.

Az elméleti görbe lefutásának fizikai értelme a következő: kis  $g$  értékekre a kristály az 1-típusú hullámra anomáliásan átlátszó. Ez az ismert Borrmann-effektusnak felel meg és megerősíti azt a tapasztalati tényt, hogy a legjobb áteresztőség



alacsony indexű Bragg-reflexiókkal érhető el.  $V'_g$  meredek csökkenése növekvő  $g$  értékkel azt jelenti, hogy az 1-típusú hullám növekvő mértékben elnyelődik (azaz az atomsúlypontok is szerephez jutnak). A 2-típusú hullám abszorpciója viszont  $g$ -vel csökken, mert növekvő  $g$ -vel csökken azoknak az atomsoroknak a száma, amelyek hosszegységenként a hullámtér rendelkezésére állnak. A negatív  $V'_g$  értékek



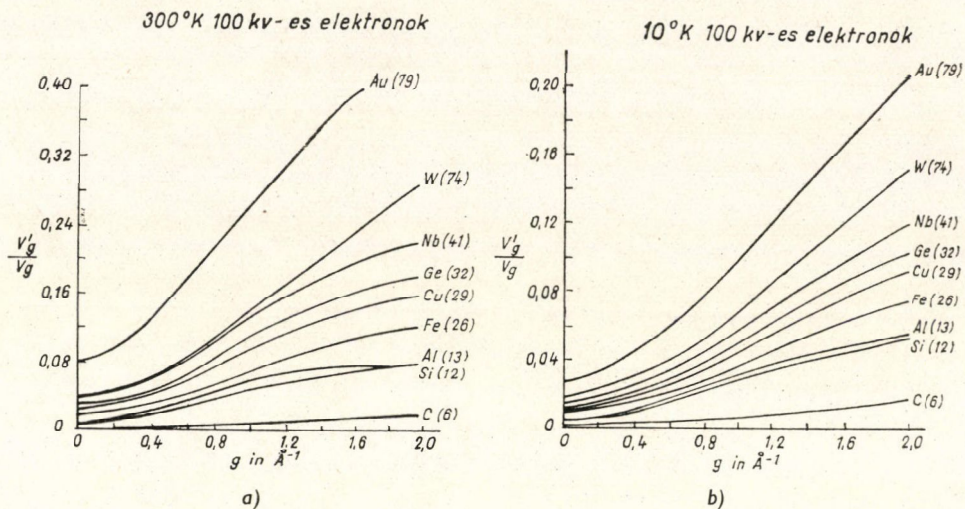
3. ábra. A  $V'_g$  abszorpciós potenciál  $g$  reflexió függése különböző hőmérsékleteken réz (a) és arany (b) esetében; gyorsítófeszültség 100 keV (Humphreys és Hirsch nyomán [5])

azt jelentik, hogy a kristály a 2-típusú Bloch-hullámot jobban átereszt, mint az 1-típusút. A vizsgált anyagokra ez az effektus mindazonáltal nem nagyon jelentős. Végül extrém  $g$  esetén, azaz amikor  $V'_g = 0$ , mindkét hullám azonos abszorpciós együtthatót eredményez.

$V'_g$ -nek a 3. ábrában bemutatott hőmérsékletfüggése a következőképpen tehető szemléletessé. Mély hőmérsékleten a termikus rácsdeformáció az extinkciós hosszhoz képest nagy. Ezért a Bloch-hullámok a rácssíkgörbületekhez hozzásimulnak. Amikor viszont magasabb hőmérsékleten a periodikus rácssíkgörbület az extinkciós hosszal összemérhetővé válik, a Bloch-hullámok nem tudják többé követni a rácssíkgörbületet. Az 1-típusú hullám többé nem koncentrált az atomsorok közti térre, és a 2-típusú hullám nem esik az atomsorokra; ezért a két hullámtér viselkedése növekvő hőmérséklettel mindinkább hasonlóvá válik: a  $\xi_g$  extinkciós hossz, valamint a  $\xi'_g$  anomális abszorpciós paraméter növekvő hőmérséklettel nőnek. Ennek következményeképpen nő  $V'_g$  is miként ez a 3. ábráról leolvasható.

A  $V'_g/V_g$  szórási viszonynak anyagfüggését a 4. ábra mutatja lapcentrált, tércentrált és gyémánt struktúrákra 100 keV gyorsítófeszültségen 10° és 300 °K hőmérsékleteken. A  $V'_g/V_g$  érték az anyag rendszámával nő, viszont a  $V'_g/V_g$  hányados képzésekor a strukturális hatások nyilván kiesnek. A görbe középső része közel lineáris, nagyon nagy  $g$  értékekre (vö. 5. ábra) a görbe meredeksége negatív lesz. Ez a 3. ábrán bemutatott negatív  $V'_g$  abszorpciós potenciálú tartományoknak felel meg. Közepes rendszámú anyagokra, mint amilyen például a Ge és Cu, valamint a gyakran használt (220) reflexiókra ( $g = 0,8 \text{\AA}^{-1}$ ) a  $V'_g/V_g = 0,1$  szobahőmér-

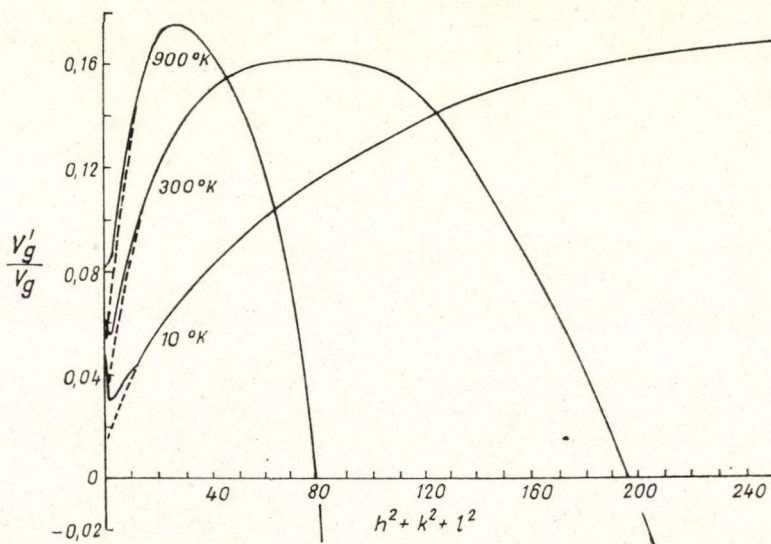




4. ábra. A  $V'_g/V_g$  szórási viszony  $g$ -től való függése különböző elemekre 300 és  $10^\circ\text{K}$  hőmérsékleten. Gyorsító feszültség 100 keV. (Humphreys és Hirsch [5])

sékleten ( $300^\circ\text{K}$ ) jól használható közelítő érték. A szórási arány vas esetében 0,07 és molibdénre 0,12, ezek az értékek nem nagyon térnek el a 0,1-es közelítő értéktől.

Az 5. ábra végül az egyes elektronoknak és a plazmaszórásnak a  $V'_g/V_g$  viszony-számra kifejtett hatását mutatja be. A  $V'_g/V_g$  viszonyszámot a  $h^2 + k^2 + l^2$  függ-



5. ábra. Az egyes elektronok és a plazmaszórás hatása a  $V'_g/V_g$  szórási viszonyra  $T = 10, 300$  és  $900^\circ\text{K}$  hőmérsékleteken. Az ábra a  $V'_g/V_g$  értékeket  $h^2 + k^2 + l^2$  függvényben mutatja (Humphreys és Hirsch után [5])

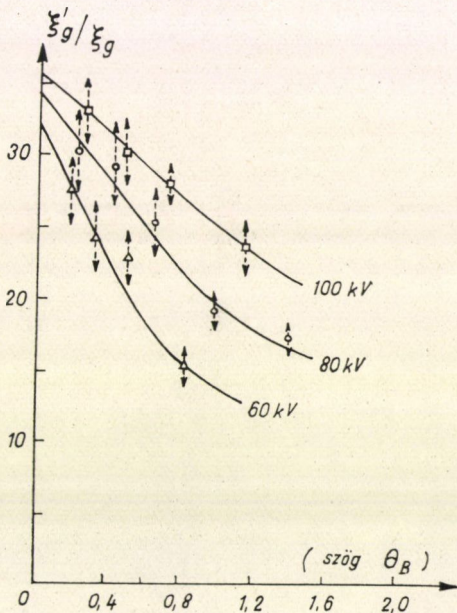


vényében ábrázoljuk, ezáltal a görbe lefutása nagy  $g$  értékekre is bemutatható. A számolások részre vonatkoznak  $10^\circ$ ,  $300^\circ$  és  $900^\circ\text{K}$  hőmérsékleten  $100\text{ keV}$  gyorsítófeszültség esetére. Előre kell bocsátani, hogy a rugalmatlan plazmaszórás a diszperziós felületek minden ágát, a Bragg-helyzettől való kis eltérésre, azonos valószínűséggel befolyásolja. Ez annyit jelent, hogy mindkét hullámtípusra a  $V'_0$ -val jellemzett átlagos abszorpció ugyanakkora. A kihúzott görbe az egyes elektronokat és a fononszórást, a szaggatott görbe csak a fononszórást mutatja. Az egyes elektrongerjesztés erős hatása kis  $g$  értékek esetében újból a két hullámtípus segítségével érthető meg szemléletesen. A 2-típusú hullám erőteljesebben szóródik, mint az 1-típusú, mivel ez utóbbi kis értékek esetében az atomokat elkerüli. Nagy  $g$  értékekre közepes abszorpció mellett mindkét hullám azonos mértékben járul hozzá az egyes elektronok szórásához.

Miként az 5. ábrából látható, az egyes elektrongerjesztés relatív részesedése csökkenő hőmérséklettel nő. Ez szemléletesen annyit jelent, hogy csökkenő hőmérséklettel a „találati valószínűség” nő, mivel mély hőmérsékleten az atomok jobban lokalizáltak, mint a magas hőmérsékletű tartományban. A görbék növekedése  $g \rightarrow 0$  esetében mély hőmérsékleten kifejezettebb. Ezért szobahőmérsékleten és ez alatt  $g \neq 0$ -ra a fononszórás domináló folyamat.

#### 5. Az objektív-appertúra befolyása az abszorpciós paraméterekre

A  $V_g/V'_g$  illetve a  $\xi_g/\xi'_g$  reciprokl szórás viszony értékeinek változását az objektív-appertúrával Metherell és Whelan [7] mérései szerint a 6. ábra mutatja. Az objektív-appertúra értékét a  $\Theta_B$  Bragg-szög egységeiben adjuk meg. A mérési tartomány  $1,5 \Theta_B$  felső határa az elektronmikroszkópiában szokásos appertúra értéknek felel meg. A mérések az Al(111) reflexióival történtek  $100$ ,  $80$  és  $60\text{ keV}$  gyorsító feszültségen. A szórás viszony száma növekvő objektív-appertúrával nő. A közepes abszorpciós hosszak  $\xi'_0$ -nak az extinkciós hosszhoz  $\xi_g$ -hez való viszonya, tehát  $\xi'_0/\xi_g$ , ezzel szemben az appertúrától független (a rajzon ezt nem tüntettük fel). Ez a mérési eredmény megfelel Metherell [9] elméleti megfontolásainak, amelyek a diffúz plazmaszórásra, valamint a kristály elektronsugár felé fordított felületének amorfszennyezettségére (szén- és oxidfilm-képződés) vonatkoznak. E két tényező ugyanis változó objektív appertúrával nem változtatja az azonos vastagságkontúrú szomszédos interferenciák  $A_n/A_{n+1}$  ( $n$  = az interferencia rendje) amplitúdó viszonyát (7. ábra), ezért  $\xi'_0/\xi_g$  a nyílásszöggel nem változik. A reciprokl szórás viszony száma



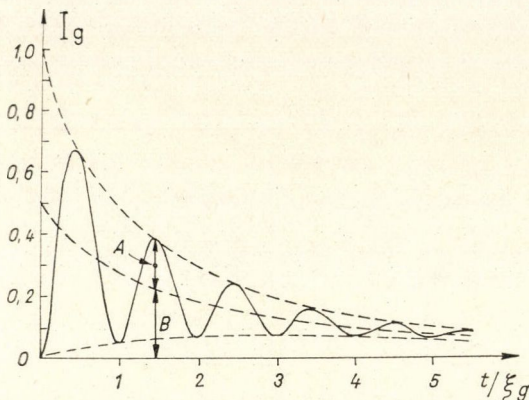
6. ábra. A szórás viszony reciprokl értékének változása az objektív appertúrával ( $\Theta_B$ ) az alumínium (111) reflexiójában két sugár esetében. (Metherell és Whelan nyomán [7])



$(\xi'_g/\xi_g)$  viszont tartalmazza az amplitúdó és a háttérintenzitás arányát  $(B_n/A_n)$ . Ez az arányszám nagyon érzékenyen reagál a szennyezés mértékére, következtésképpen  $\xi'_g/\xi_g$  appertúrafüggő.

A 6. ábra a  $\xi_g/\xi'_g$  szórási viszony feszültségfüggését is mutatja. A viszonzszám növekvő energiával csökken. Ez a körülmény fényt vet az abszorpciónak és a kromatikus hibának a legnagyobb feszültségű tartományban (100 keV—1 MeV) fellépő problémáira. Az ebben a feszültségi tartományban végzett első elméleti vizsgálatok (Hirsch és Humphreys [8]) a következőképpen foglalhatók össze:

1. az átteresztőképesség növekvő feszültséggel, illetve növekvő  $v/c$  értékkel ( $v$  = az elektron sebessége,  $c$  = fénysebesség) 200 keV-ig szigorúan lineárisan nő (8. ábra). Ez a növekedés 200 keV felett már nem lineáris, mivel többszörös szóródási effektusokat is figyelembe kell venni. A jellemző mértékszámok a  $\xi'_g/\xi_g$  reciprok szórási viszony, valamint az abszorpciós paraméter  $\xi'_0/\xi_g$ , attól függően, hogy a Bragg-reflexió abszorpcióját, vagy mindkét hul-

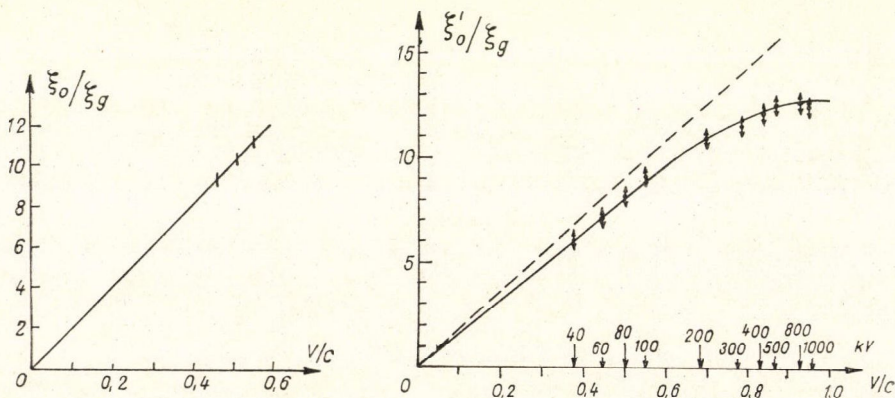


7. ábra. A vastagságkontúr sötétítési intenzitása  $I_g$  a kristályvastagság  $(t)$  függvényében.  $A$  — amplitúdó-intenzitás,  $B$  — háttérintenzitás (Metherell és Whelan [7])

lám típus átlagos abszorpcióját vesszük figyelembe, Metherell [9].

2. Ugyancsak lényegesen csökken növekvő feszültséggel a szórási veszteség okozta kromatikus hiba.

3. A kromatikus hibát az alkalmazható rétegvastagság szempontjából csak akkor kell figyelembe venni, ha nagy feloldásra törekszünk.



8. ábra.  $\xi'_0/\xi_g$  változása  $v/c$ -vel.

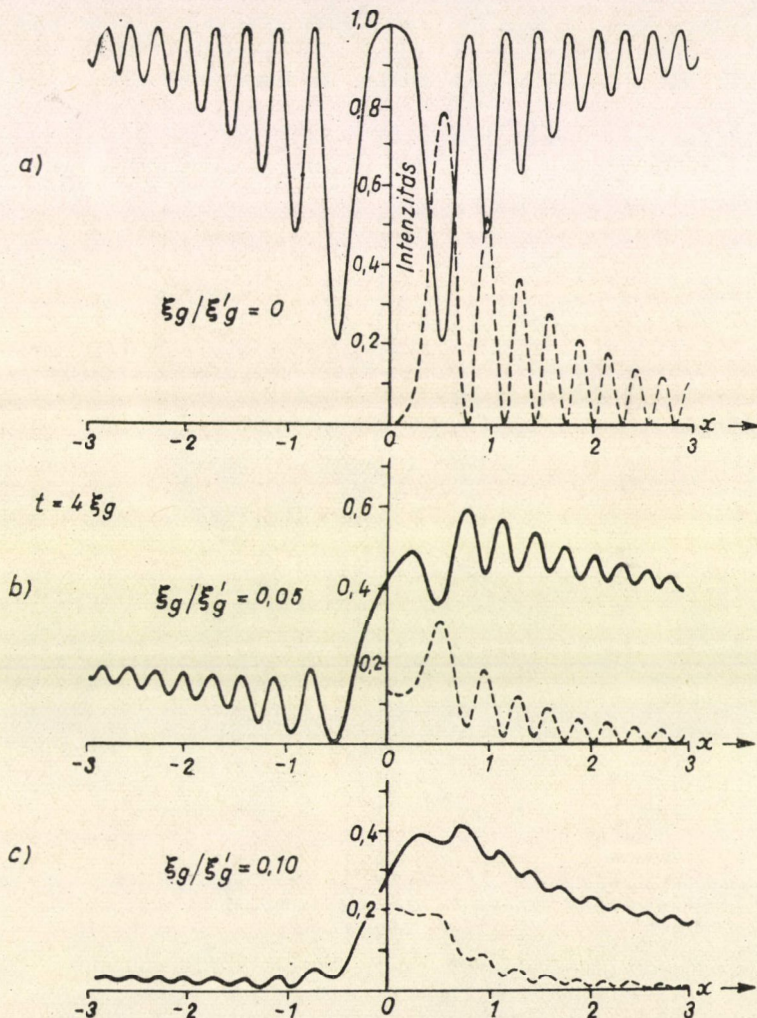
a) kísérleti görbe az alumínium (111) reflexiójára b) elméleti görbe a kétsugaras esetre (szaggatott görbe) és a többsugaras esetre (kihúzott görbe). (Metherell és Whelan [7])



4. A rétegvastagság felső határát meghatározó két legfontosabb tényező valószínűleg az abszorpció és a képkontraszt éspedig nehéz elemeknél bármilyen, könnyű elemek esetében kis feszültségekre.

6. Az abszorpció hatása egyes rácshibák elektronmikroszkópos leképzésére

A  $V_g'/V_g$  érzékeny változása nem egyszerűen olyan értelemben változtatja a képintenzitást, hogy az intenzitás növekvő abszorpcióval arányosan csökken. Az abszorpció ugyanis az intenzitáseloszlás egészének lefolyására, tehát az intenzitásprofilra



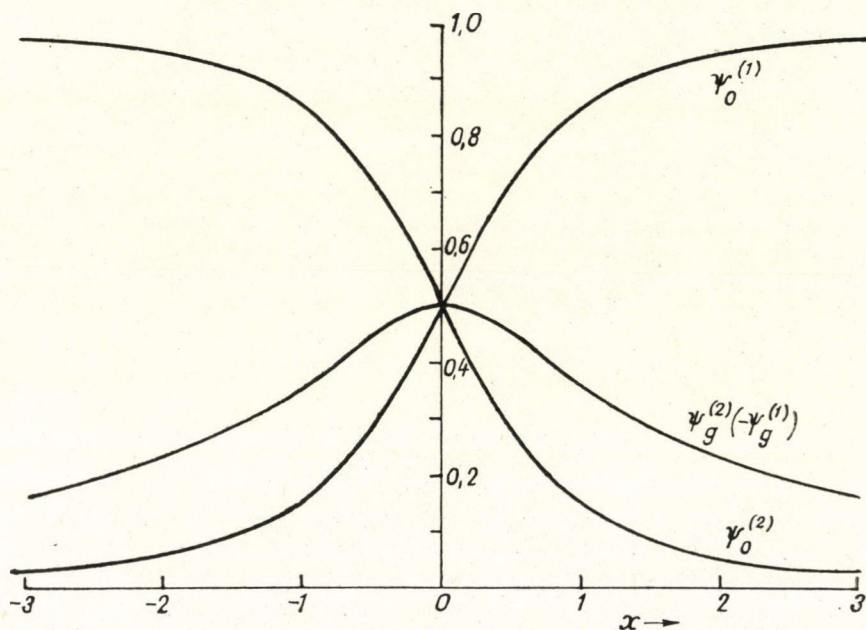
9. ábra. Rocking-görbék a kétsugaras elmélet szerint  $t=4\xi_g$  kristályvastagságra. Az eltűnő, a gyenge és az erős abszorpciót  $\xi_g/\xi_g' = 0, 0,05$  és  $0,10$  értékek adják meg. Kihúzott görbék — világostér, szaggatott görbék — sötétter (Hashimoto, Howie és Whelan [4])



gyakorol igen érzékeny hatást. A  $V_g'/V_g$ , illetőleg a  $\xi_g/\xi_g'$  numerikus értéke az abszorpció hatásának kritikus mennyisége. Ezt a körülményt jól mutatja a probléma fenomenologikus tárgyalása (Hashimoto, Howie és Whelan [4]).

A 9. ábra számított ún. rocking-görbéket mutat, azaz a  $\Psi_0^2$ ,  $\Psi_g^2$  intenzitásoknak az  $x$  elhajlási hibától való függését  $t=4\xi_g$  rétegvastagságra. A  $\xi_g/\xi_g'=0, 0,05$  és  $0,1$  eltűnő, gyenge, illetve erős abszorpciót jelent. A kihúzott görbék a világostér, a szaggatott görbék pedig a sötétter intenzitásokra vonatkoznak. A világos- és sötétter intenzitások egymáshoz képest ellentétes fázisúak.  $\xi_g/\xi_g'=0$  értékre mindkét görbe  $x=0$ -hoz szimmetrikus; a sötétlátótér görbék növekvő abszorpcióval szimmetrikusak maradnak  $x=0$ -hoz, csupán intenzitásértékeik csökkennek. Ezzel szemben a világostér görbék növekvő abszorpcióval mind aszimmetrikusabbakká válnak. A középső intenzitásszint negatív  $x$  értékekre erősebben csökken, mint pozitív  $x$  értékekre. Az intenzitásmaximumok viszont mindkét oldalon azonos mértékben csökkennek.

Ez a lefutás szemléletessé tehető a  $\Psi_0^{(1)}$  és  $\Psi_0^{(2)}$ ,  $\Psi_g^{(1)}$ ,  $\Psi_g^{(2)}$  1- és 2-típusú hullámoknak az  $x$  elhajlási hibával változásának vizsgálatával mind transzmisszióban,

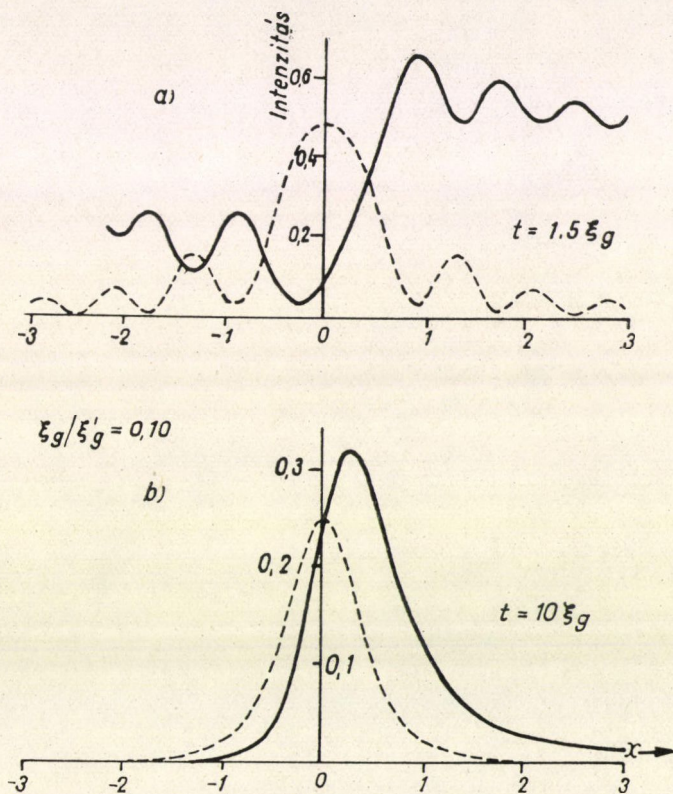


10. ábra. A  $\Psi_0^{(1)}$ ,  $\Psi_0^{(2)}$ ,  $\Psi_g^{(1)}$ ,  $\Psi_g^{(2)}$  hullámamplitúdók függése az  $x$  elhajlási hibától (Hashimoto, Howie és Whelan [4])

mind pedig reflexióban (10. ábra). Az áteresztett  $\Psi_0^{(1)}$ ,  $\Psi_0^{(2)}$  hullámok — típusuktól függetlenül —  $x$  aszimmetrikus függvényei; ezzel szemben a reflektált  $\Psi_0^{(1)}$ ,  $\Psi_0^{(2)}$  hullámokhoz  $x$ -ben szimmetrikus hullámfüggvények tartoznak. Pozitív  $x$  esetében tehát az átbocsátott 1-típusú hullám a kristályban erősebb gerjesztést kap, 2-típusú hullámok esetében viszont negatív  $x$ -re erősebb a gerjesztés. Ezért a sötétlátóteres



kép szimmetriája (vö. 9. ábra) éppen a reflektált hullámok hullámfüggvényeinek szimmetriája miatt közvetlenül evidens. A transzmittált 1-típusú hullámra nézve az abszorpció kisebb, mivel a hullámok rezgési maximumai az atomsorok között vannak; a megfelelő 2-típusú hullám erősebben abszorbeálódik, mivel e hullámok rezgési maximumai az atomsorokon fekszenek. A hullámfüggvények gerjesztésének ez az  $x=0$ -hoz viszonyított aszimmetriája a világostér rocking-görbék aszimmetriájában jut kifejezésre. A rocking-görbék mellékoszcillációi a  $\Psi_0^{(1)}, \Psi_0^{(2)}$  hullámok interferenciáiból származnak. Ezért ezek amplitúdói csökkennek, mégpedig pozitív és negatív  $x$  értékekre egyenlő mértékben.

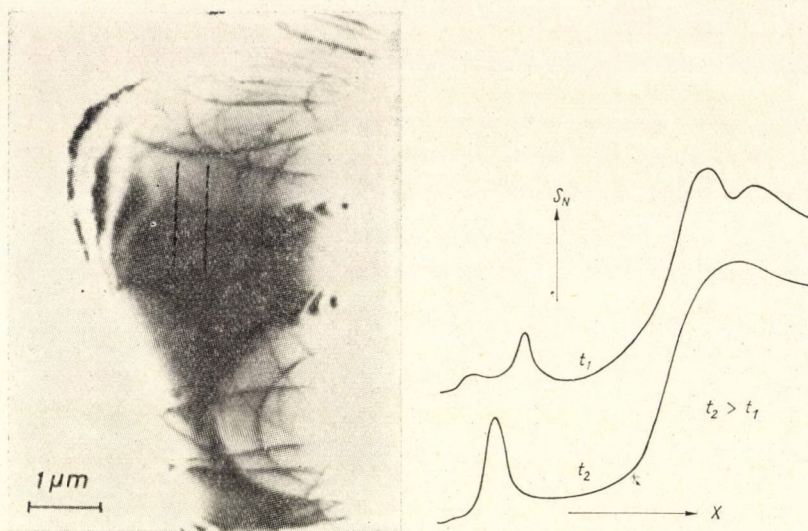


11. ábra. Rocking-görbék  $\xi_g/\xi'_g = 0,10$  és  $t = 1,5 \xi_g$ , illetve  $t = 10 \xi_g$ -re.  
Kihúzott görbék: világostér, szaggatott görbék — sötétter  
(Hashimoto, Howie és Whelan [4])

Adott szórási helyzetben a rocking-görbékben észlelhető aszimmetria növekvő rétegvastagsággal erőteljesebben jut kifejezésre (11. ábra). A diagram erős abszorpció esetére ( $\xi_g/\xi'_g = 0,10$ ), a két  $t$  kristályvastagságra (1,5 és 10 extinkciós hosszak) készült. Kisebb rétegvastagságok esetében a világostér aszimmetria nagyon erősen kifejezett. Növekvő rétegvastagsággal a mellékoszcillációk eltűnnek és a világostér intenzitás-maximum  $x=0$ -hoz tart.



Az aszimmetria változása rocking-görbékben kísérletileg különösen jól megfigyelhető, ha változó vastagságú kristályok hajlítási kontúrjai adóttak. A 12. ábra egy alumíniumfólia hajlítási kontúrjáról készült elektronmikroszkópos felvételt, valamint a hozzátartozó denzitogramot mutatja be  $t_1$  és  $t_2$  rétegvastagságokra. A  $t_1$ -nél még megfigyelhető mellékmaximumok  $t_2$ -nél egyetlen maximummá olvad-



12. ábra. Az Al egy vastagságkontúrjának negatív feketedés ( $S_N$ ) denzitogramjai tetszőleges egységben, az  $x$  elhajlási hiba függvényében  $t_1$  és  $t_2$  tárgyvastagságra. Világostér (111) reflexiók, gyorsítófeszültség 45 kV. A  $t_1$  és  $t_2$  mérési vonalai berajzolva.

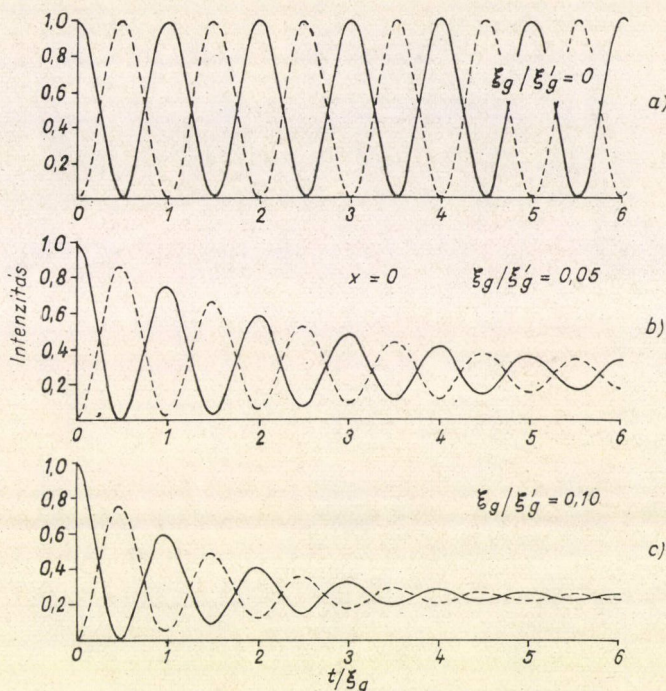
tak össze. Az aszimmetria rétegvastagsággal való növekedése még abban is kifejezésre jut, hogy a háttér és a jobb oldali maximum közti feketedési különbség  $t_1$ -re 12,5 és  $t_2$ -re 14,2 (tetszőleges egységek).

Az abszorpciónak a vastagságkontúrra gyakorolt hatása ék alakú kristályok esetében igen tanulságos és jól áttekinthető. A 13. ábra a vastagságkontúrok elméleti profiljait mutatja az extinkciós hosszban megadott rétegvastagság függvényében az egyes tárgyalandó abszorpciós esetekre  $x=0$  elhajlási eltérésre. A világostér görbék kihúzottak, az ellenfázisú sötétter-görbék szaggatottak. Abszorpció nélkül ( $\xi'_g/\xi_g=0$ ) az intenzitás lefutása a rétegvastagságtól független lenne; növekvő rétegvastagsággal azonban a rezgési amplitúdók nőnek. Egyedül az abszorpciónak kell tulajdonítani, hogy azonos vastagságú interferenciák képet hoznak létre. Az elektronmikroszkópos felvételek háttéréből kiemelkedő rezgések száma az abszorpciós paraméter  $\xi'_g$ , illetőleg a  $\xi_g/\xi'_g$  szórási viszony mértéke. A 14. ábra az alumínium (111) reflexiójáról készült világostér kép vastagságkontúrjainak negatív feketedését ( $S_N$ ) mutatja. A denzitogram összesen hét, csökkenő amplitúdójú oszcillációt mutat, miként ezt elméletileg várni is lehet.

Az abszorpció igen érzékenyen befolyásolja továbbá a rétegződési hibákon keresztül futó intenzitáslefolyást. Ennek az esetnek elméleti görbéjét közepes és



erős abszorpciókra, valamint 7,25 extinkciós hosszúságú rétegvastagságra a 15. ábra mutatja. A  $z/\xi_g$  helykoordináta eredete a rétegződési hiba középpontjában fekszik. A világostér intenzitás ebben az esetben a középponthoz szimmetrikus, a sötétter intenzitás viszont aszimmetrikus. Az intenzitásértékek a rétegződési hiba

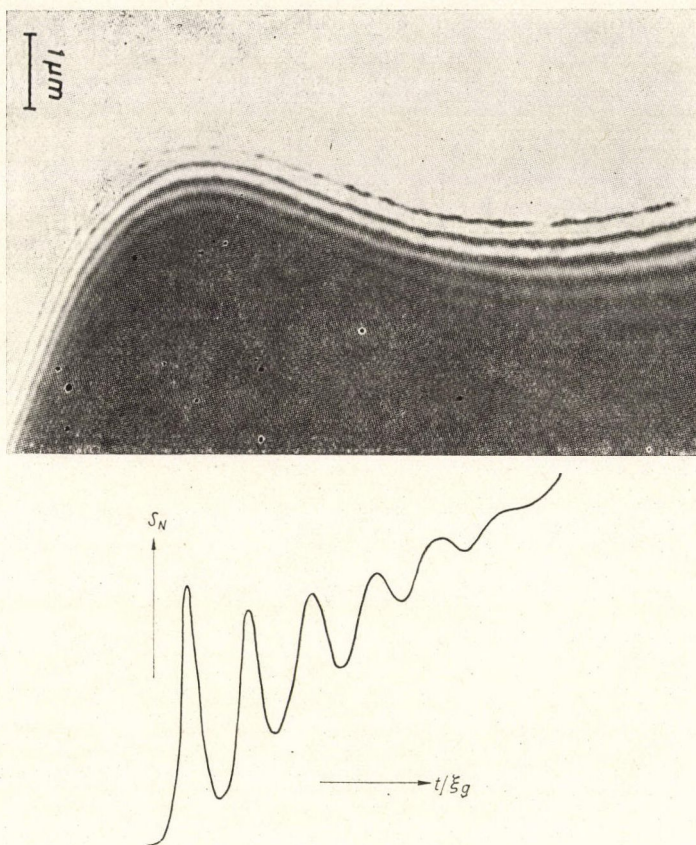


13. ábra. A  $\xi_g/\xi'_g = 0, 0,05$  és  $0,10$  vastagságkontúrok elméleti profiljai. Kihúzott görbék — világostér, szaggatott görbék — sötétter (Hashimoto, Howie és Whelan [4])

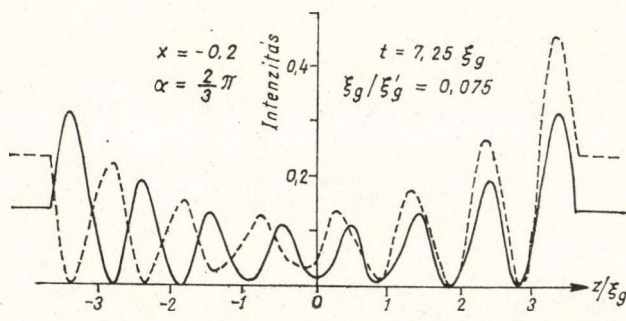
szélén magasak, a középpontban viszont alacsonyak. E tény megértéséhez tekintetbe kell venni, hogy a rétegződési hiba síkja határsík, amely két komplementér éket különít el egymástól. A határfelületen a hullámterek számát egy kettes faktorialal meg kell szorozni. A bonyolult kölcsönhatásokat itt nem tárgyaljuk közelebbről, azonban szemléletes az a körülmény, hogy az abszorpció hatása az ék szegélyein, a középponthoz képest kisebb súllyal érvényesül. Az elméleti megfontolásokat a kísérleti tények megerősítik (16. ábra). A világostér (bal), és sötétter (jobb) felvételek komplementaritásából ( $Q$ -nál) és pseudokomplementaritásából ( $P$ -nél) a rétegződési hiba elhelyezkedése feltárható.

Maradjunk a rétegződési hibák példájánál, de térjünk vissza a plazmaszóráshoz, mely a rétegződési hibák példáján áttekinthetőbben tárgyalható (Metherell, [9]). A 17. ábra diagramjai különböző adottságú rétegződési hibákra, gyenge abszorpcióra ( $\xi_g/\xi'_g = 0,036$ ) az elméleti világostér intenzitásokat mutatják. Az alsó diagram kihúzott görbéje, a szórási viszonyok különbségeitől eltekintve (0,075 a 15. ábrában)



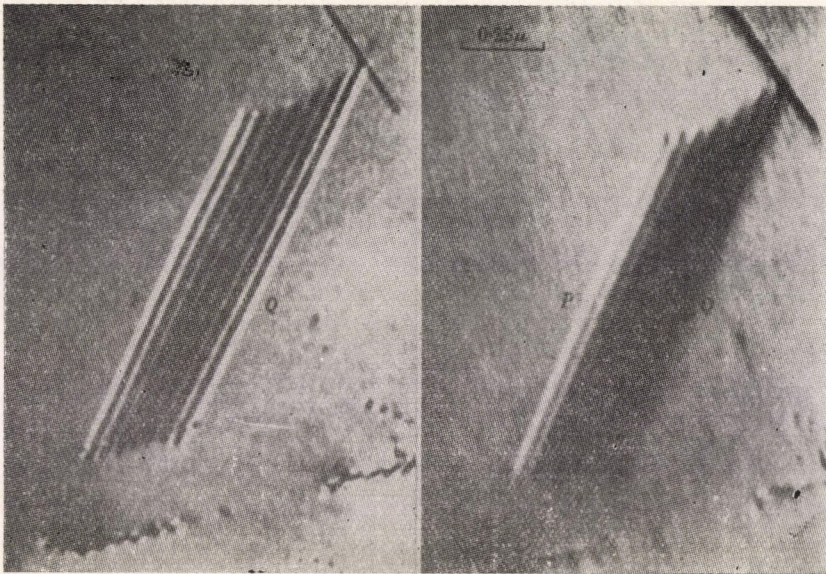


14. ábra. Alumínium egy vastagságkontúrja tetszőleges egységben kifejezett negatív feketedésének ( $S_N$ ) relatív rétegvastagság ( $t/\xi_g$ ) függése. Világostér (111) reflexió, 45 kV.

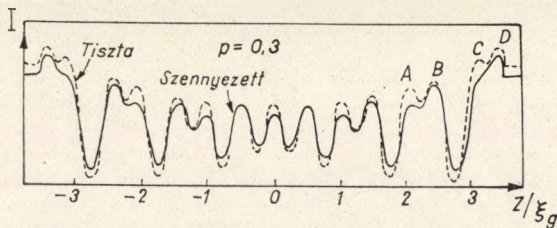
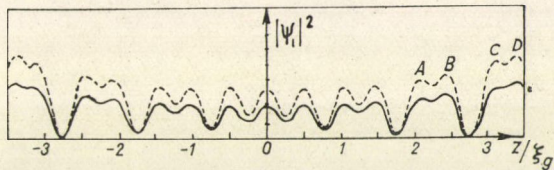


15. ábra. Rétegződési hiba elméleti kontúrprofilja. Kihúzott görbe — világostér, szaggatott görbe — sötétter. (Hashimoto, Howie és Whelan [4])





16. ábra. Egy Cu—7%-Al ötvözet (111) reflexiójáról készült rétegződési hibafelvétel sötét és világos térben. A felvétel a 15. ábrának felel meg.  $G$  és  $P$  a rétegződési hiba nyoma a sugárbelépés,- ill. kilépésének helyén (Hashimoto, Howie és Whelan [4])



17. ábra. Egy rétegződési hiba világostér-intenzitásának lefutása gyenge,  $\xi_g/\xi'_g = 0,036$ , abszorpció esetében. *Alul:* a kihúzott görbe tekintetbe veszi az amorf szennyeződést; a szaggatott görbe szennyezésmentes kristályra vonatkozik. *Felül:* szaggatott görbe — egyszeri plazmaszórás; kihúzott görbe — többszörös plazmaszórás (Metherell [7])



a Hashimoto-elmélet intenzitásprofiljának felel meg és így a 15. és 16. ábrában bemutatott esettel közvetlenül összehasonlítható. A kihúzott görbe intenzitásait amorf szennyezés csökkenti, ilyen szennyezés a sugár belépési felületén (a kristály sugárforrás felőli oldalán) lerakódó oxid- vagy szénréteg lehet. A  $p=0,3$  szennyezési paraméter  $130\text{Å}$  rétegvastagságnak felel meg. Ilyen viszonyok mellett az elektronok már diffúzul szórva lépnek be a kristályba. Finomabb hatásoktól eltekintve az intenzitásmaximumok csökkennek, a minimumok nőnek. A mellékmaximumok (*A*, *C*) erősebben csökkennek, mint a főmaximumok (*B*, *D*). A szennyezés a plazmaszórástól ezeknek az effektusoknak a segítségével különböztethető meg. A plazmaszórás hatását a felső diagramon mutatjuk be.

A szaggatott görbe azzal a feltételezéssel készült, hogy minden elektron csak egyszeresen szóródott, azaz minden elektron csak egy plazmont gerjesztett. Többszörös szóródás (kihúzott görbe) az intenzitást abszolút értelemben csökkenti. Ezenfelül még egy relatív intenzitásváltozás is észlelhető, ami abból adódik, hogy a szórási folyamat során az elhajlási eltérés változik.

Összefoglalólag a következőket lehet megállapítani: a különböző típusú kristályhibák kontrasztprofiljai csak a Bloch-hullámok abszorpciójának figyelembevételével érthetők meg. *Humphrey* elmélete egész sor elem nagyobb számú reflexiójára fontosabb abszorpciós paraméter értékeket adott meg, ezért további, finomabb effektusok értelmezése is lehetségessé válik.

#### IRODALOM

1. *Kamiya, Y. és Uyeda, R.* J. Phys. Soc. Japan, 16, 1361, 1961.
2. *Moliere, K.* A nn. d. Physik, 34, 461, 1939.
3. *Yoshioka, H.*, J. Phys. Soc. Japan, 12, 628, 1957.
4. *Hashimoto, H.*, *Howie, A.* és *Whelan, M. J.* Proc. R. Soc. A 269, 80, 1962.
5. *Humphreys, C. J.* és *Hirsch, P. B.* Phil. Mag. 16, 115, 1968.
6. *Hall, C. R.*, *Hirsch, P. B.* Proc. R. Soc. A 286, 158, 1965.
7. *Metherell, A. J. F.*, *Whelan, M. J.* Phil. Mag. 15, 755, 1967.
8. *Hirsch, P. B.*, *Humphreys, C. J.*: Electron Microscopy 1968, Tipografia Vaticana, Roma, 1968. 49. oldal.
9. *Hirsch, P. B.*, *Howie, A.*, *Nicholson, R. B.*, *Pashley, D. W.* és *Whelan, M. J.*: Electron Microscopy of thin Crystals. Butterworth, London, 1965. 435. oldal.



# A KALCIUM, STRONCIUM ÉS BÁRIUM FÉMEK ELEKTRONSZERKEZETE II.\*

VASVÁRI BÉLA

MTA Atommag Kutató Intézete, Debrecen

## TARTALOM

3. A kalcium, stroncium és bárium fémek sávstruktúrája
    - 3.1. Az energiamátrix, másodrendű korrekciók
    - 3.2. A szekuláris egyenlet konvergenciája
    - 3.3. A kalcium fém energiaspektruma, az energianívók identifikálása
    - 3.4. Az energiaspektrum függése az atomi térfogattól, a stroncium és bárium fémek sáv szerkezete
    - 3.5. A sávstruktúrák értékelése
  4. A kalcium fém Fermi-felülete
    - 4.1. A konstans energiájú felületek síkmetszetei
    - 4.2. A de Haas—van Alphen-effektus
    - 4.3. Ciklotron tömegek
  5. A vezetőképesség számítása
    - 5.1. A vezetőképesség tenzora, egyszerű modell a Fermi-felületre
    - 5.2. A  $\tau$  relaxációs idő
    - 5.3. A vezetőképesség a csökkenő térfogat függvényében, összehasonlítás a mérési eredményekkel
  6. Néhány további kísérletileg ellenőrizhető adat
    - 6.1. Az elektron fajhő hőmérsékleti együtthatója, a paramágneses szuszceptibilitás
    - 6.2. Elektron és lyuk koncentrációk, a töltéshordozók mozgékonyasága, a Hall együttható
    - 6.3. Ultrahang abszorpció, mágneses térbeli ellenállásváltozás, a kalcium lágy röntgen spektruma
  7. Köszönetnyilvánítás
- Függelék
- A) Tércsoportok irreducibilis előállításainak bázisvektorai
  - B) A nem-lokális leárnýékolt modell potenciál Fourier koefficiensei
  - C) Perturbációszámítás a magasabbrendű mátrixelemek figyelembevételére

Irodalom

### 3. A kalcium, stroncium és bárium fémek sávstruktúrája

E fejezetben bemutatjuk, hogyan használható a LMP fémek elektromos sáv-spektrumának meghatározására. Célunk olyan energiamátrix megkonstruálása, melynek segítségével a BZ minél több pontjában meghatározhatjuk az elektronok  $\epsilon(k)$  energiáját, mint a  $k$  hullámszámvektor függvényét. Valamennyi  $k$  pontban ugyanazon 8-adrendű  $H_{ij}$  mátrixot használjuk, a LMP nem lokális volta miatt azonban figyelembe kell vennünk a mátrixelemek  $k$ -függését. A reciprok rács nagyobb abszolút értékű  $G$  vektoraihoz tartozó mátrixelemeket egy másodrendű perturbációszámítás segítségével figyelembe vesszük 8-adrendű mátrixunkban. Megvizsgáljuk

\* Kandidátusi disszertáció, I. rész megjelent, Magyar Fizikai Folyóirat, 18, 1970.



a kapott energiaértékek konvergenciáját. Bemutatjuk, hogyan történik a mátrix saját értékeként kapott energianívók szimmetriatípusok szerinti identifikálása, majd megvizsgáljuk, hogyan változnak eredményeink, ha csökkentjük az elemi cella  $\Omega$  térfogatát. Így az egyensúlyi állapothoz tartozó tulajdonságok vizsgálata mellett támpontot szeretnénk nyerni a kalcium, stroncium és bárium fémek nyomás alatti tulajdonságainak értelmezésére.

### 3.1. Az energiamátrix, másodrendű korrekciók

A 2.3. fejezetben megbeszéltük alapján a vezetési elektronokra vonatkozó  $H_{ij}(k)$  energiamátrix a következő alakban írható fel

$$\bar{H}_{ij}(k) = [(k + G_i)^2 + \langle k|U|k \rangle + H_0] \delta_{ij} + \langle k + G_i|U|k + G_j \rangle \quad (3.1.1)$$

Itt röviden  $|k\rangle$ -val jelöltük a  $k$  hullámszámvektorhoz tartozó  $\psi_k$  síkhullámot.  $U$  mátrixelemeit síkhullámok között a (2.3.21) képlet szolgáltatja. A  $\langle k|U|k \rangle$  mátrixelem, mely az energiamátrix diagonálisában lép fel, konstans ( $k$ -től független) lenne egy lokális potenciál esetén (Ziman, 1960, 194. oldal). Ugyancsak megmutatható (III), hogy ugyanezen konstans értéket veszi fel a  $\langle k|U|k \rangle$  mátrixelem akkor is, ha a  $k$  vektor a Fermi-felület pontjaiba mutat. Tekintettel arra, hogy mi elsősorban a BZ felületi pontjaiban érdeklődünk az  $\varepsilon(k)$  energiák iránt, mely pontok a kétvegyértékű fémek esetében közel kell, hogy essenek a Fermi-felülethez, azért a  $\langle k|U|k \rangle$  mátrixelem  $k$ -függésétől eltekintettünk, és mint állandót beolvasztottuk az energia zéruspontját — vagyis az energiasávok abszolút helyzetét — meghatározó konstansba. A  $H_0$  jelenti vezetési elektronok egymás közti Coulomb és kicserélődési energiáját (lásd a (2.3.1)–(2.3.2) egyenletekben az  $l$ -szerinti összegeket). A vezetési elektronokat síkhullámokkal reprezentálva ezek ismét csak egy, az elektron-gáz sűrűségétől függő, de a  $k$ -től független járulékot adnak, mint azt a (2.2.14) képlettel kapcsolatban részben már megbeszéltük, ezért a  $H_0$ -t is beolvasztjuk az energia zéruspontját meghatározó tagba.

A  $G_i, G_j$  vektorok elvileg a reciprok rács valamennyi pontján végigfutnak, ami más szóval azt jelenti, hogy elvileg a  $H_{ij}$  végtelen rendű mátrix. Gyakorlatilag természetesen csak a reciprok tér origója körüli néhány  $G_i$  vektort tudjuk közvetlenül figyelembe venni, vagyis a  $H_{ij}$  mátrixot egy véges rendszámra levágjuk. Az elhagyott elemek is számításba vehetők, azonban a másodrendű perturbációszámítás segítségével anélkül, hogy a  $H_{ij}$  rendjét növelnénk. A perturbációszámítás mintegy bevetíti a levágott mátrixelemek hatását a megmaradt mátrixelemek módosítása révén. Az egyszerű számítást a C függelékben mutatjuk be, itt csak a végeredményt vesszük át, elhagyva mindjárt a zéruspontot meghatározó  $k$ -től független tagokat:

$$\bar{H}_{ij}(k) = (k + G_i)^2 \delta_{ij} + \langle k + G_i|U|k + G_j \rangle + \sum_G \frac{\langle k + G_i|U|k + G \rangle \langle k + G|U|k + G_j \rangle}{(k + G_j)^2 - (k + G)^2} \quad (3.1.2)$$

Az összegezésből elhagyandók azok a  $G$  vektorok, amelyeket a jobb oldal második tagjában  $G_i, G_j$  vektorok gyanánt már felhasználtunk.

Következő lépésként konkretizálni kell a felhasználandó  $G_i(G_j)$ ,  $G$  vektorokat, s ezzel a  $H_{ij}$  mátrix rangját. Az alumínium fém esetében Harrison (1960), majd empi-



rikusan Aschcroft (1963) az egyszerű pseudopotenciális közelítésben le tudták írni a Fermi-felületet és a sávstruktúrát úgy, hogy négy  $G_i$  vektort használtak, tehát negyedrendű  $H_{ij}$  mátrixot. A négy reciprok rács vektor gyanánt azokat választották, amelyek a BZ  $W$  pontjában a legalacsonyabb energiaértékhez tartoznak a szabad elektron közelítésben, más szóval a reciprok tér origóját, a  $G_1 = (0, 0, 0)$  vektort, és az origó első szomszédai a  $(2\pi/a)(1, 1, 1)$  típusú vektorok közül azokat, amelyekre a  $k_W + G_i$  vektor hossza ugyanaz, mint a  $k_W$  vektoré, ahol  $k_W$  a  $W$  pontba mutató vektor:  $k_W: (2\pi/a)(1, 1/2, 0)$ . Itt és a továbbiakban is a lapon centráltnál rács rácsparaméterét jelenti, melynek numerikus értékei a 2.2. táblázatban megtalálhatók.

Tekintettel arra, hogy mi a potenciálunk nemlokális volta miatt több paramétert kell hogy használjunk, és a sávstruktúrára is nagyobb pontosságot szeretnénk elérni (Harrison pontossága kb. 0,03 ry volt), azért a reciprok tér azon vektorait vettük figyelembe, melyek a szabad elektron közelítésben az első két legalacsonyabb energiaértéket adják. Ezek száma 8 és  $2\pi/a$  egységekben a következők

$$\begin{aligned} G_1 &= (0, 0, 0) & G_5 &= (0, -2, 0) \\ G_2 &= (-1, -1, 1) & G_6 &= (-2, -2, 0) \\ G_3 &= (-1, -1, -1) & G_7 &= (-1, 1, 1) \\ G_4 &= (-2, 0, 0) & G_8 &= (-1, 1, -1) \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

Így  $\bar{H}_{ij}$  energiamátrixunk 8-adrendű.

A másodrendű korrekcióban szereplő  $G$  vektorok gyanánt az összes

$$\begin{aligned} (1, 1, 1); & \quad (2, 0, 0); & (2, 2, 0); & \quad (3, 1, 1); \\ (2, 2, 2); & \quad (4, 0, 0); & (4, 2, 0); & \quad (1, 3, 3); \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

típusú vektorokat használtuk, kivéve ezek közül természetesen a (3.1.3)-ban megadott vektorokat. Így a felhasznált síkhullámok száma összesen  $8 + 105 = 113$  volt.

3.1. TÁBLÁZAT

$G_i \backslash G_j$	(0, 0, 0)	(-1, -1, 1)	(-1, -1, -1)	(-2, 0, 0)	(0, -2, 0)	(-2, -2, 0)	(-1, 1, 1)	(-1, 1, -1)
(0, 0, 0)		0,0406	0,0406	0,0236	0,0656	-0,0303	0,0477	0,0477
(-1, -1, 1)			0,0378	0,0549	0,0430	0,0430	0,0766	-0,0388
(-1, -1, -1)				0,0549	0,0527	0,0430	-0,0388	0,0766
(-2, 0, 0)					-0,0247	0,0766	0,0564	0,0564
(0, -2, 0)						0,0930	-0,0379	-0,0379
(-2, -2, 0)							-0,0214	-0,0214
(-1, 1, 1)								0,0958
(-1, 1, -1)								

A  $\langle k + G_i | U | k + G_j \rangle$  ( $i \neq j$ ) mátrixelemek a szabad elektron Fermi-felületén a  $W$  pont közelében, a  $k = k_{F_0}$  ( $1, 1/2, 0$ ) pontban. A  $G_i$  és  $G_j$  vektorok a táblázatban  $2\pi/a = 1$  egységekben, a mátrixelemek rydbergekben vannak megadva.



Próbaképpen megalkottuk a  $\bar{H}_{ij}$  energiamátrixot az  $L$  pontból kiindulva is. Itt ismét  $8G_i$  vektor adja a legalacsonyabb energiaértéket a szabad elektron közelítésben, melyek nem pont ugyanazok, mint a  $W$  esetében (ismét  $2\pi/a$  egységekben):

$$\begin{aligned} G_1 &= (0, 0, 0) & G_5 &= (0, -2, 0) \\ G_2 &= (-1, -1, -1) & G_6 &= (-1, 1, -1) \\ G_3 &= (-2, 0, 0) & G_7 &= (0, 0, -2) \\ G_4 &= (1, -1, -1) & G_8 &= (-1, -1, 1) \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

A  $G$  vektorok gyanánt ugyanazon típusúakat használtunk, mint a  $W$  pont esetében, természetesen most a (3.1.5) vektorok voltak a kivételek.

3.2. TÁBLÁZAT

$G_i \backslash G_j$	(0, 0, 0)	(-1, -1, 1)	(-1, -1, -1)	(-2, 0, 0)	(0, -2, 0)	(-2, -2, 0)	(-1, 1, 1)	(-1, 1, -1)
(0, 0, 0)	-0,0082	0,0036	0,0036	-0,0037	-0,0073	-0,0068	0,0037	0,0037
(-1, -1, 1)	0,0033	-0,0119	-0,0024	0,0066	0,0025	0,0045	-0,0063	-0,0039
(-1, -1, -1)	0,0033	-0,0024	-0,0119	0,0066	0,0025	0,0045	-0,0039	-0,0063
(-2, 0, 0)	-0,0033	0,0064	0,0064	-0,0131	-0,0029	-0,0057	0,0055	0,0055
(0, -2, 0)	-0,0028	0,0022	0,0022	-0,0019	-0,0327	-0,0097	-0,0100	-0,0100
(-2, -2, 0)	-0,0030	0,0032	0,0032	-0,0024	-0,0081	-0,0347	-0,0061	-0,0061
(-1, 1, 1)	0,0028	-0,0030	-0,0027	0,0038	-0,0106	-0,0080	-0,0282	-0,0053
(-1, 1, -1)	0,0028	-0,0027	-0,0030	0,0038	-0,0106	-0,0080	-0,0053	-0,0282

A másodrendű korrekciók a LMP Fourier koefficienseihez. A  $k$ ,  $G_i$ ,  $G_j$  vektorok és az egységek ugyanazok, mint a 3.1. táblázatban.

3.3. TÁBLÁZAT

$G_i \backslash G_j$	(0, 0, 0)	(-1, -1, -1)	(-2, 0, 0)	(1, -1, -1)	(0, -2, 0)	(-1, 1, -1)	(0, 0, -2)	(-1, -1, 1)
(0, 0, 0)		0,0032	0,0626	0,0513	0,0626	0,0513	0,0626	0,0513
(-1, -1, -1)			0,0400	0,0456	0,0400	0,0456	0,0400	0,0456
(-2, 0, 0)				-0,0740	0,0142	0,0628	0,0142	0,0628
(1, -1, -1)					0,0628	0,0242	0,0628	0,0242
(0, -2, 0)						-0,0740	0,0142	0,0628
(-1, 1, -1)							0,0628	0,0242
(0, 0, -2)								-0,0740
(-1, -1, 1)								

A  $\langle k + G_i | U | k + G_j \rangle$  ( $i \neq j$ ) mátrixelemek a szabad elektron Fermi-felületén az  $L$  pont közelében a  $k = k_{F_0}(1/2, 1/2, 1/2)$  pontban. A  $G_i$  és  $G_j$  vektorok a táblázatban  $2\pi/a=1$  egységekben, a mátrixelemek rydbergekben vannak megadva.

A numerikus eredményeket tartalmazzák a 3.1.—3.4. táblázatok. Ismét szembe-tűnő a potenciál nemlokalitása (egyforma módon vannak aláhúzva azok az elemek, melyek lokális potenciál esetén egyenlők lennének), megnyugtató viszont, hogy a másodrendű korrekció valóban csak kis korrekciót jelent — abszolút értéke a nem diagonális elemeknél sehol sem nagyobb 0,01 ry-nél, a diagonális elemeknél viszont a kinetikus energiához, a  $(k + G_i)^2$ -hez képest továbbra is kicsinyek maradnak.



## 3.4. TÁBLÁZAT

$G_i \backslash G_j$	(0, 0, 0)	(-1, -1, -1)	(-2, 0, 0)	(1, -1, -1)	(0, -2, 0)	(-1, 1, -1)	(0, 0, -2)	(-1, -1, 1)
(0, 0, 0)	-0,0042	-0,0011	0,0032	0,0054	0,0032	0,0054	0,0032	0,0054
(-1, -1, -1)	-0,0012	-0,0021	0,0024	0,0009	0,0024	0,0009	0,0024	0,0009
(-2, 0, 0)	0,0021	0,0018	-0,0383	0,0007	-0,0071	-0,0057	-0,0071	-0,0057
(1, -1, -1)	0,0037	0,0006	0,0004	-0,326	-0,0052	-0,060	-0,0052	-0,0060
(0, -2, 0)	0,0021	0,0018	-0,0071	-0,0057	-0,0383	0,0007	-0,0071	-0,0057
(-1, 1, -1)	0,0037	0,0006	-0,0052	-0,0060	0,0004	-0,0326	-0,0052	-0,0060
(0, 0, -2)	0,0021	0,0018	-0,0071	-0,0057	-0,0071	-0,0057	-0,0383	0,0007
(-1, -1, 1)	0,0037	0,0006	-0,0052	-0,0060	-0,0052	-0,0060	0,004	-0,0326

A másodrendű korrekciók az LMP Fourieroefficienseihez. A  $k$ ,  $G_i$ ,  $G_j$  vektorok és az egységek ugyanazok, mint a 3.3. táblázatban.

A másodrendű korrekciók hozzávétele a  $\bar{H}_{ij}$  mátrixelemekhez tetemesen megnöveli a numerikus munkát, elsősorban a  $\langle k' | U | k \rangle$  mátrixelemekben levő  $I(q)$  kifejezés kiszámítása jelenti a nehézséget a benne szereplő, csak numerikusan kezelhető integrál miatt. Ha a teljes sávstruktúrára kíváncsiak vagyunk, továbbá ha a Fermi-felület alakját is számításokkal akarjuk meghatározni, akkor gyakorlati okokból engednünk kell az eddig használt és (3.1.2)-ben megfogalmazott pontosságból.

Tekintettel arra, hogy a másodrendű korrekciók amúgyis csak kicsiny módosításokat jelentenek a nem diagonális mátrixelemekhez, eltekintettünk ennek a korrekciónak a  $k$ -függésétől. Az egész összeget csak a  $W$  pontban számítottuk ki és a kapott értéket mint lokális tagot tekintettük a mátrixelemek kifejezésében, vagyis a  $W$  pontbeli értékét használtuk a BZ minden más pontjában is. Gyakorlatilag tehát a következő energiamátrixot használtuk:

$$H_{ij}(k) = (k + G_i)^2 \delta_{ij} + \langle k + G_i | U | k + G_j \rangle + \sum_G \frac{\langle k_w + G_i | U | k_w + G \rangle \langle k_w + G | U | k_w + G_j \rangle}{(k_w + G)^2 - (k_w + G_j)^2} \quad (3.1.6)$$

A keresett  $\varepsilon(k)$  energiaértékek ezen  $H_{ij}(k)$  mátrix sajátértékeiként jelentkeznek, más szóval ezek gyökei a

$$\det |H_{ij}(k) - \varepsilon(k) \delta_{ij}| = 0 \quad (3.1.7)$$

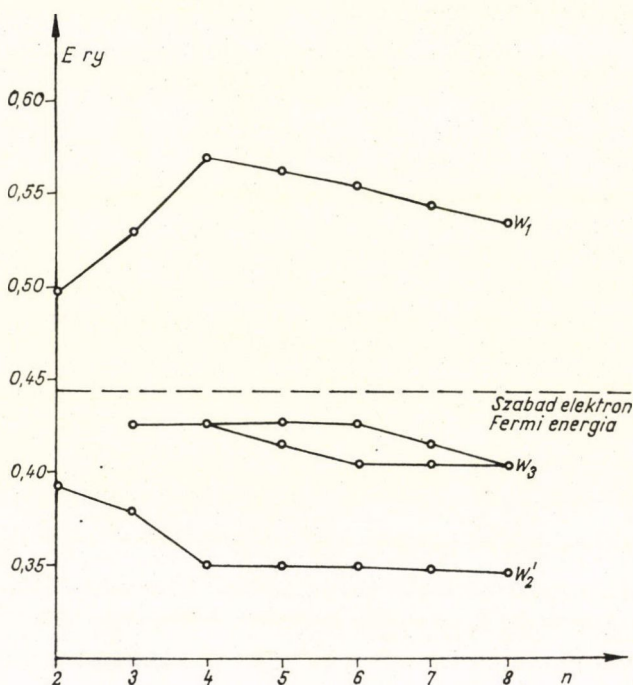
egyenletnek. Ez utóbbi két egyenlet volt az alapja a sávstruktúrára vonatkozó számításoknak. (Az egyszerűség kedvéért itt ismét  $\varepsilon(k)$ -val jelöltük a kiszámítandó energianívókat, a 2.3. fejezetben  $\varepsilon(k)$  az egyszerű síkhullám energiát jelentette és  $\varepsilon(k)$  volt a keresett energiaértékek jele.) A  $G_i$  vektorok gyanánt a  $W$  ponthoz tartozó (3.1.3) rendszert használtuk minden  $k$  pontban. Igaz, hogy e rendszer nem tartalmazta mindazokat a  $G_i$  vektorokat, amelyek a BZ más pontjában is a két legalacsonyabb szabad elektron energianívót adnák, de legfeljebb 1–2  $G_i$  vektort kellett volna kicserélni, amelyek már amúgyis — a szabad elektron közelítésben a második — a tényleges esetben valamelyik magasabb energianívóhoz tartoznának, így ettől a kis inkonzekvenciától eltekintettünk annak érdekében, hogy a BZ minden  $k$  pontjában ugyanazon egységes rendszert használhassunk. Lefixálva tehát egy  $k$  vektort a (3.1.3)-beli  $G_i$  vektorokkal és a (3.1.4)-beli  $G$  vektorokkal megkonstruáltuk a (3.1.6) energiamátrixot e pontban a  $H_{ij}(k)$ -t, majd ennek  $\varepsilon(k)$  sajátértékei, azaz a (3.1.7) egyenlet gyökei szolgáltatják az  $\varepsilon(k)$  energiaértékeket. Így egyszerre a 8 legalacso-



nyabb energiaértéket nyerjük minden  $k$  pontban, tehát elvileg a legalsó 8 energiasávba tartozó pontokat. Ezek közül azonban legfeljebb a legalacsonyabb négy érték az, amire szükségünk lesz az elektromos tulajdonságok értelmezésénél, melyek közül a szimmetriatulajdonságok következtében még lehetnek többszörös energiaértékek is (pl. a  $W$  és  $\Gamma$  pontokban).

### 3.2. A szekuláris egyenlet konvergenciája

Az előző fejezetben már láttuk, hogy a másodrendű perturbációval figyelembe vett mátrixelemek járuléka nem haladja meg a 0,01 ry-et, ami azt jelenti, hogy a perturbációs sor kielégítően konvergens. Hátra van még annak eldöntése, vajon elegendő volt-e a 8 síkhullám figyelembevétele, azaz a 8-adrendű energiamátrix használata.



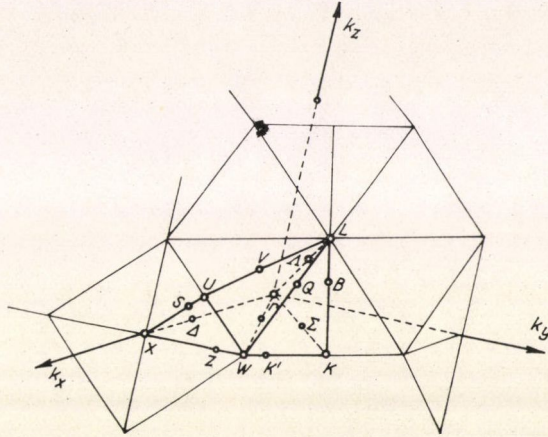
3.1. ábra. Az energianívók konvergenciája a  $W$  pontban  
n: a szekuláris determináns rendje — E: energiák rydbergekben.

A kérdés eldöntése céljából meghatároztuk a  $W$  pontbeli  $\varepsilon(k_W)$  energiaértékeket mint az energiamátrix rendje függvényét. Az eredményeket tartalmazza a 3.5. táblázat és a 3.1. ábra, melyekből világosan látszik, hogy az  $\varepsilon(k_W)$  energiaértékek konvergenciája teljes mértékben megnyugtató, ha figyelembe vesszük, hogy még e viszonylag nagy pontossággal megkonstruált potenciál sem, de a másodrendű korrekció  $k$ -függésének az elhanyagolása sem tenné lehetővé, hogy az energiaértékek 0,01 ry-nél pontosabbak legyenek.



## 3.3. A kalcium fém energiaspektruma, az energianívók identifikálása

Az  $\varepsilon(k)$  energiaértékek meghatározása két lépésben történt. Első lépésként programot írtunk a (3.1.6)-tal megadott  $H_{ij}$  mátrixelemek lokális, tehát  $k$ -tól független részének meghatározására. Ez magában foglalta a 2.3. fejezetben definiált  $V(q)$ ,  $\varepsilon q$ ,  $I(q)$  mennyiségek, valamint a másodrendű korrekció (röviden:  $\Sigma$ ) meghatározást a  $k_W = (2\pi/a)(1, 1/2, 0)$  pontban. A  $q$  paraméter most  $q = |G_i - G_j|$ , és a nyert mátrixelemek nyilván szimmetrikusak az  $i, j$  indexekben.



3.2. ábra. A fcc rács Brillouin-zónájának 1/48-ad része. A szimmetriapontok és egyenesek koordinátái  $2\pi/a = 1$  egységekben

$\Gamma: (0, 0, 0)$	$A: \xi(1, 0, 0)$	$V: \left(\frac{1}{2} + 2\eta, \frac{1}{2} - \eta, \frac{1}{2} - \eta\right)$
$X: (1, 0, 0)$	$Z: \xi\left(1, \frac{1}{2}, 0\right)$	$Q: \left(\frac{1}{2} + 2\eta, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2\eta\right)$
$W: \left(1, \frac{1}{2}, 0\right)$	$A: \xi\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$	$K': \left(1 - \eta, \frac{1}{2} + \eta, 0\right)$
$K: \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right)$	$\Sigma: \xi\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right)$	$S: (1, \eta, \eta)$
$L: \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$	$B: \left(\frac{1}{2} + \eta, \frac{1}{2} + \eta, \frac{1}{2} - 2\eta\right)$	
$U: \left(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	$(0 \leq \xi \leq 1) \quad \left(0 \leq \eta \leq \frac{1}{4}\right)$	

Második programunk bemenő paraméterként használta a  $H_{ij}$  mátrixelemek előbb kiszámított lokális részét. E program vezérlő része sorra vette a BZ azon  $k$  pontjait, melyben az  $\varepsilon(k)$  energiaértékeket ki akartuk számítani, ehhez a  $k$ -hoz meghatározta a  $H_{ij}$  mátrix nem lokális részét, mely megbeszélte közelítésünknek megfelelően nem más, mint a (2.3.27)-tel definiált egyszerű  $F(k + G_i, k + G_j)$  függ-



3.5. TÁBLÁZAT

$n$	$\varepsilon_{W_2}$	$\varepsilon_{W_3}$	$\varepsilon_{W_1}$
2	0,3930		0,4990
4	0,3544	0,4266	0,5695
6	0,3502	0,4006	0,5551
8	0,3472	0,4006	0,5371

A  $W_2$ ,  $W_3$  és  $W_1$  energianívok konvergenciája. Az energiaértékek rydbergekben vannak adva és  $n$  jelenti a szekuláris egyenlet rendjét.

Szimmetriaokok miatt nyilvánvalóan elegendő csak a teljes BZ  $1/48$ -ad részére számolni. Itt sorra vettük az összes szimmetriapontokat, tehát  $2\pi/a$  egységekben a

$$\begin{aligned}
 \Gamma &= (0, 0, 0) & L &= (1/2, 1/2, 1/2) \\
 X &= (1, 0, 0) & K &= (3/4, 3/4, 0) \\
 W &= (1, 1/2, 0) & U &= (1, 1/4, 1/4)
 \end{aligned}
 \tag{3.3.1}$$

pontokat, valamint bármely két szimmetriapontot összekötő szimmetriatengely mentén 14—14 osztáspontot. Programunk táblázatokat nyomtatott ki, melynek fejlécén a két szimmetriapont koordinátái voltak feltüntetve, majd külön-külön sorban az osztáspontok sorszámát (0-dik az egyik végpontbeli szimmetriapont, 15-dik a másik végpontbeli) és a 8 energia-sajátértéket. A numerikus eredményeket fotókopiákön mutatjuk be a 3.6.a—3.6. táblázatokban és a 3.4.—3.5. ábrákon. Az ábrákon feltüntetett  $\varepsilon_F$  Fermi-energia meghatározásának módszerét a 4. fejezetben ismertetjük.

Érdekes összehasonlítani a most nyert sávstruktúrát a szabad elektron közelítésnek megfelelő sávstruktúrával (lásd 1.6—1.8. ábrákat). Látható, annak ellenére, hogy a LMP erősen nem lokális, mégis a nyert sávstruktúra nem tér el nagyon a szabad elektron sávstruktúrától, amit egyébként a Ca esetén el is várunk, hiszen egy zárt iontörzsről kívüli viszonylag lazán kötött  $4s$  elektronok alakítják ki a fémek sajátságokat. Mindjárt meg is jegyezzük, hogy a fémek sajátságai a sávstruktúrában abban nyilvánulnak meg, hogy a vezetési elektronok két legalsó energiasávja között nincsen tiltott sáv, mert a két sáv átfedi egymást. Ez világosan látszik a 3.4. ábrából, mely mutatja, hogy az első sáv legmagasabb energiaértéke ( $W'_2$ ) a  $W$  pontban kb. 0,10 ry-gel magasabban van, mint a második sáv legalacsonyabb energiaértéke ( $L'_2$ ) az  $L$  pontban. Ezen kívül a számítások numerikus részéből is világosan látszik, hogy az  $LW$  és  $LK(U)$  egyenesek mentén fellépő véletlen degeneráció (accidental degeneracy) miatt ugyancsak nincsen energiáris a két sáv között, habár itt átfedésről nyilván nem beszélhetünk.

Az egyes energianívok identifikálása most nem triviális feladat, mivel az egyidejűleg kapott 8 sajátértékről nem látszik rögtön, melyik irreducibilis előállításhoz tartozik. Ha a sajátenergiákhoz a megfelelő sajátfüggvényeket is kiszámítottuk volna, akkor ezek szimmetriatulajdonságai megadták volna az energianívok szimmetriáját is, de a sajátfüggvények meghatározását szeretnénk elkerülni, minthogy úgysem lesz rájuk szükség később sem.

vény. Az eredményt hozzáadva a beolvasott lokális komponensekhez, előáll a teljes  $H_{ij}(k)$  energiamátrix, melynek (3.1.7) szerinti sajátértékei adják a  $k$  ponthoz tartozó  $\varepsilon(k)$  energiaértékeket. A vezérlő program új  $k$  pontot választott, erre megismételte az előbbi számításokat, előállt az új  $\varepsilon(k)$  érték, és így tovább.

Ily módon számításokat végeztünk először a lapon centrált köbös rendszerű kalcium fém BZ-jára (lásd 1.4. és 3.2. ábrákat).



## 3.6. a)–c) TÁBLÁZATOK

Az alábbi következő táblázatok tartalmazzák a kalcium fém energiasáv spektrumára kapott numerikus értékeket. Az egyes résztáblázatok első sorában a BZ egy-egy szimmetriapontjának koordinátái találhatók  $2\pi/a=1$  egységekben. E szimmetriapontokat összekötő egyeneseket 15 osztásponttal részekre osztottuk. A 0-ás osztópont felel meg az első szimmetriapontnak, a 15-ös a másodiknak. A táblázatok rydbergekben tartalmazzák az egyes osztáspontokhoz tartozó energiaértékeket, mint a 8-adrendű szekuláris determináns zérushelyeit.

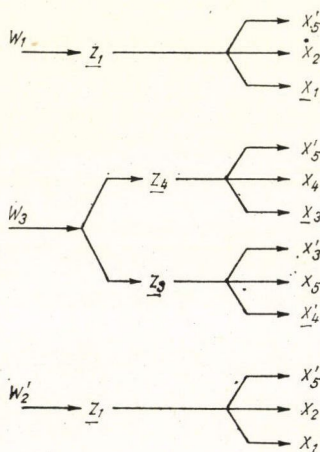
	0.00	0.00	0.00	0.50	0.50	0.50		
	15	0,2606	0,8734	0,2469	0,8714	1,0750	1,6700	1,7330
	14	0,2227	0,8745	0,2868	1,0650	1,0786	1,7629	1,6431
	13	0,1933	0,8770	0,3222	1,0667	1,0868	1,8187	1,5960
	12	0,1657	0,8811	0,3598	1,0705	1,0992	1,8799	1,5493
	11	0,1401	0,8871	0,3994	1,0764	1,1154	1,9446	1,5051
	10	0,1165	0,8838	0,4410	1,0841	1,1351	2,0122	1,4644
	9	0,0951	0,8902	0,4844	1,0935	1,1577	2,0826	1,4278
a)	8	0,0758	0,8983	0,5295	1,1044	1,1826	2,1556	1,3964
	7	0,0586	0,9081	0,5762	1,1162	1,2088	2,2312	1,3717
	6	0,0438	0,9193	0,6243	1,1283	1,2347	2,3095	1,3566
	5	0,0311	0,9320	0,6733	1,1396	1,2581	2,3902	1,3550
	4	0,0208	0,9458	0,7227	1,3694	1,2782	2,4735	1,1494
	3	0,0127	0,9607	0,7714	1,3967	1,2988	2,5592	1,1589
	2	0,0070	0,9766	0,8179	1,4319	1,3237	2,6474	1,1714
	1	0,0036	0,9944	0,8591	1,4719	1,3540	2,7380	1,1910
	0	0,0026	1,0574	1,2202	1,3895	1,5155	2,8311	0,8910
	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00		
	15	0,3693	0,8524	0,7698	0,2822	1,8515	1,6946	0,4659
	14	0,2699	0,8561	0,7705	0,3837	1,6867	1,8627	0,4678
	13	0,2415	0,8668	0,7728	0,4185	1,6630	1,8963	0,4736
	12	0,2102	0,8843	0,7767	0,4609	1,6337	1,9420	0,4832
	11	0,1794	0,9080	0,7824	0,5077	1,6038	1,9948	0,4967
	10	0,1502	0,9374	0,7900	0,5581	1,5753	2,0526	0,5140
	9	0,1231	0,9719	0,8348	0,6121	1,5491	2,1147	0,7996
b)	8	0,0984	1,0108	0,8478	0,6696	1,5254	2,1807	0,8116
	7	0,0762	1,0536	0,8634	0,7305	1,5047	2,2502	0,5886
	6	0,0568	1,0998	0,8817	0,7947	1,4870	2,3233	0,6210
	5	0,0403	0,8616	0,9028	1,1492	1,4728	2,3997	0,6571
	4	0,0266	0,9316	0,9270	1,2012	1,4623	2,4795	0,8870
	3	0,0160	1,0032	0,9544	1,2552	1,4568	2,5625	0,9138
	2	0,0085	0,9852	1,0758	1,3092	1,4586	2,6488	0,9442
	1	0,0040	1,0195	1,1485	1,3572	1,4747	2,7384	0,8373
	0	0,0026	1,0574	1,2202	1,3895	1,5155	2,8311	0,8910
	1,0	0,50	0,00	0,50	0,50	0,50		
	15	0,2606	0,8734	0,2469	0,8714	1,0750	1,6700	1,7330
	14	0,2606	0,8267	0,2474	0,8665	1,0265	1,6280	1,6859
	13	0,2615	0,8590	0,2499	0,7817	0,9930	1,6401	1,5882
	12	0,2634	0,8463	0,2543	0,7383	0,9681	1,5956	1,5507
	11	0,2662	0,8258	0,2607	0,6967	1,0682	1,5524	1,5157
	10	0,2708	0,7984	0,2680	0,6571	1,0688	1,5106	1,4830
	9	0,2799	0,7669	0,2736	0,6195	1,0699	1,4526	1,4704
c)	8	0,2917	0,7338	0,2793	0,5841	1,0715	1,4234	1,4329
	7	0,3051	0,5509	0,2859	0,7006	1,0734	1,3901	1,4036
	6	0,3199	0,6681	0,2936	0,5199	1,0754	1,3546	1,3810
	5	0,3359	0,6369	0,3024	0,4913	1,0775	1,3203	1,3620
	4	0,3527	0,6075	0,3122	0,4651	1,0795	1,2878	1,3464
	3	0,3694	0,5810	0,3230	0,4415	1,0811	1,3342	1,2581
	2	0,3847	0,5586	0,3340	0,4212	1,0822	1,3255	1,2327
	1	0,3962	0,5428	0,3437	0,4061	1,0774	1,3205	1,2143
	0	0,5371	0,4006	0,4006	0,3472	1,2077	1,0815	1,3192



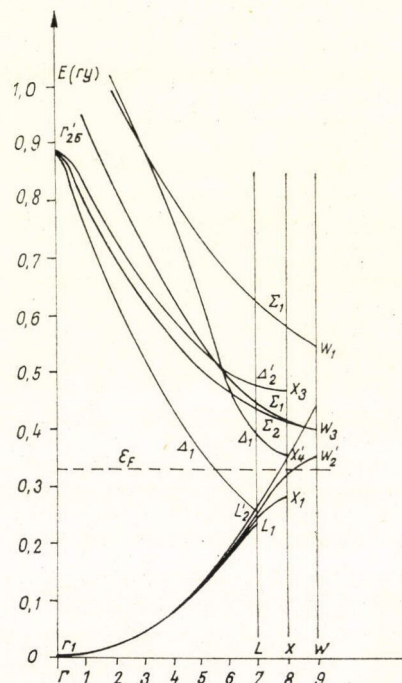
Az egyes energianívók identifikálására abból indultunk ki, hogy a LMP-lal nyert sávstruktúra nem különbözik lényegesen a szabad elektron közelítéshez tartozó sávstruktúrától. Egyben tájékozódás céljából az egyszerű pseudopotenciális közelítés (1.6.8)–(1.6.11) formuláit is felhasználtuk.

A másik lényeges támpont a csoportelmélet adta kompatibilitási relációk, melyek megmondják, hogy kiindulva egy meghatározott szimmetriájú energianívóból, mondjuk a BZ egy szimmetriapontjában, milyen szimmetriájú  $\varepsilon(k)$  görbék csatlakozhatnak e nivóhoz, ha a szimmetriapontról egy szimmetriaegyesre vagy síkra mozdulunk el. E kompatibilitási relációk megszerkesztése igen egyszerű feladat a  $k$  vektor csoportjához tartozó karakterrendszerek segítségével, és részletes leírása az irodalomban számos helyen megtalálható (lásd pl. Bouckaert, Smoluchowski, Wigner, 1936). E relációk az egyszerű pseudopotenciál közelítés segítségével alkalmasnak bizonyultak arra, hogy az identifikálást egyértelműen elvégezzük.

A  $W$  pontnál kezdhetjük (3.3. ábra). A numerikus eredményekből (lásd a 3.4. ábrát) közvetlenül látszik, hogy a három legalsó nivó közül a középső a kétszeresen degenerált  $W_3$  energianívó. (Az energianívók jelölésére általános szokás szerint a megfelelő irreducibilis előállítás jelét használjuk.) Az (1.6.10) képletből az is világos, hogy  $V_{111}$  előjele dönti el, hogy a  $W_1$  és  $W'_2$  nivók közül melyik az alacsonyabb. Minthogy a LMP  $V_{111}$  Fourier komponensei — bár a nem lokalitás miatt még ugyanazon  $k$  pontban is vehetnek fel különböző értékeket — határozottan pozitívak, ebből leolvasható, hogy a  $W$  pontban az energianívók sorrendje  $W'_2, W_3, W_1$ .



3.3. ábra. Az energiasávok kompatibilitási relációk által megengedett indexezési lehetőségei a  $W$ — $Z$ — $X$  tengely mentén. Az aláhúzott indexek az eredményeket jelentik



3.4. ábra.  $E(k)$  energiagörbék a fcc kalciumra a BZ origójából induló szimmetriatengelyek mentén atmoszférikus nyomáson. Energiaértékek a  $\Gamma_1$  állapothoz viszonyítva, rydbergekben vannak megadva



Továbbmenve az  $X$  pont irányába a  $WX$  egyenes  $Z$ -vel jelölt pontjaiban a  $W_1$  és  $W'_2$  nívókkal csak a  $Z_1$  kompatibilis, a kétszeres degenerált  $W_3$  nívó pedig felbomlik a  $Z_3, Z_4$  nívókra, de egyelőre nem tudjuk melyik az alacsonyabban fekvő. Beérve az  $X$  pontba, a szabad elektron közelítés legalacsonyabb nívója a kétszeresen elfajult  $X_1, X'_4$  nívó, a következő a négyszeresen elfajult  $X_1, X_3, X_5$  nívó (lásd 1.8. ábrát). Joggal feltehetjük, hogy a LMP felhasítja az  $X_1, X_4$  degenerációt, és mivel a  $W'_2$ -ből jövő  $Z_1$  nívó csak  $X_1$ -gyel kompatibilis, világos, hogy a legalacsonyabb energianívó az  $X$  pontban  $X_1$ . A  $W_3$ -ból jövő  $Z_3$  nívó az  $X'_3, X'_4, X_5$  nívókkal, a  $Z_4$  az  $X_3, X_4, X'_5$  nívókkal kompatibilis. A legalacsonyabb szabad elektronnívó  $X'_4$  összevetője jelenti az  $X$  pontban a második energianívót, ez így eldönti, hogy a  $Z_3, Z_4$  nívók közül a  $Z_3$  az alacsonyabb. A magasabb  $Z_4$  nívó pedig a szabad elektron közelítés második elfajult nívói közül, azaz az  $X_1, X_3, X_5$  nívók közül csak az  $X_3$ -mal kompatibilis, így világos, hogy a harmadik nívó az  $X$  pontban  $X_3$ .

$X$ -ből  $U$  felé haladva az  $XU$  egyenes  $S$ -sel jelölt pontjain haladunk át. Az  $X_1$ -gyel az  $S_1, X'_4$ -gyel az  $S_3$  és  $X_3$ -mal ismét az  $S_1$  kompatibilis. Az  $U$  pont szimmetriája ugyanaz, mint az  $S$  egyenesé, így  $U$ -ban az energianívók sorrendje ugyancsak  $U_1, U_3, U_1$ . Egyébként az  $U$  és  $K$  pontokbeli energiaértékek egymással szimmetriaokok következtében megegyeznek [a  $K = (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0)$  pont egy  $C_2: (x, y, z) \rightarrow (-z, -y, -x)$  forgatással a  $(0, -\frac{3}{4}, -\frac{3}{4})$  pontba, majd ebből a  $G = (1, 1, 1)$  reciproktérvektor hozzáadásával az  $U = (1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  pontba megy át], így egyben a  $K$ -pontbeli energiaértékek sorrendjét is megkaptuk:  $K_1, K_3, K_1$ .

Az  $U$  pontból a  $W$  pontba, visszafelé az  $\bar{U}$  pontokon át jutunk. Az  $\bar{U}$  csoportja az egységelemen kívül egyetlen tükrözést tartalmaz:  $(x, y, z) \rightarrow (-x, y, z)$ , így az állapotok vagy szimmetrikusak, ( $\bar{U}_1$ ), vagy antiszimmetrikusak ( $\bar{U}_2$ ) e tükrözéssel szemben. Ezért  $U_1$  az  $\bar{U}_1$ -gyel,  $U_3$  az  $\bar{U}_2$ -vel kompatibilis.

Visszaérkezve a  $W$ -pontba, jó kontroll lehetőséget jelent az, hogy a befutó  $\varepsilon(k)$  görbék szimmetriája a  $W$ -pontbeli energiaértékekhez tartozó szimmetriákkal kompatibilis.

Rátérve a hexagonális lapon a  $WL$  egyenes  $Q$  pontjaira, ismét egyértelműen a  $W_2$  állapot a  $Q_2$ -vel kompatibilis, így az alacsonyabban induló  $\varepsilon(k)$  görbe a  $Q_2$  irreducibilis előállítás szerint transzformálódik, röviden: antiszimmetrikus. A numerikus eredmények határozottan mutatják, hogy a  $WL$  egyenes mentén két sáv (két  $\varepsilon(k)$  görbe) keresztezi egymást. A szabad elektron közelítésben az  $L$ -pontbeli kétszeresen degenerált energianívó az  $L_1 L'_2$ , mely ha felhasad, akkor a felső lesz az  $L'_2$ , mert csak ez kompatibilis az ide befutó  $Q_2$ -vel. De akkor az alsó lesz az  $L_1$  és visszafelé ez a  $Q_1$ -gyel kompatibilis, mely a harmadik sávhoz tartozó, ismét  $Q_2$  szimmetriájú görbével együtt indult a  $W_3$ -ból.

Az  $L$  pontból visszatérve a  $K$ -hoz a  $B$  pontokban ismét csak szimmetrikus  $B_1$ , az antiszimmetrikus  $B_2$  állapotok lehetnek, az  $L_1, L'_2$  állapotok mindegyike azonban csak a szimmetrikus  $B_1$  állapottal kompatibilis, a  $K$  végpontban viszont ismét mind a  $K_1$ , mind a  $K_3$  állapotok csak  $B_1$  szimmetriájú állapotokba mehetnek át. Így a két sávnak az  $LK$  egyenes mentén látható kereszteződése nem a szimmetriaviszonyok által megkövetelt véletlen degeneráció, ami azt jelenti, hogy a potenciálnak kis módosításával (pl. a spin-pálya kölcsönhatás figyelembevételével) e degeneráció megszüntethető lenne.

Mínthogy a LMP konstrukciójánál fogva csak a Fermi-felület környezetébe eső  $k$  pontokban tekinthető jó közelítésnek, azért a BZ középpontjában, a  $\Gamma$  pontban nem tekinthetők a formális számolás révén kapott eredmények túl megbízhatóknak.



Erre utal az is, hogy a legalacsonyabb energiájú  $\Gamma_1$  állapotban az energiaértékek kisse a zérusnívó alá merülnek, továbbá az, hogy a magasabb energiaállapotok szimmetria megkiváncsán degenerációja nem marad meg (lásd 3.4. ábrát és a 3.6. táblázatokat). A szabad elektron közelítés második, 8-szorosan degenerált  $\Gamma_1, \Gamma'_2, \Gamma_{15}, \Gamma'_{25}$  nívója szétesik a két háromszorosan degenerált  $\Gamma_{15}$  és  $\Gamma'_{25}$  állapotokra valamint a két egyszeres  $\Gamma_1$  és  $\Gamma'_2$  állapotokra. Az  $L_2$  állapotból az origó felé haladva a  $A_1$  állapotba jutunk, amely mind a négy  $\Gamma_1, \Gamma'_2, \Gamma_{15}, \Gamma'_{25}$  állapottal kompatibilis, ez tehát nem dönt e második  $\Gamma$ -beli energiaérték szimmetriájáról. Az  $X_3$  állapot a  $A'_2$ -vel, ez pedig a  $\Gamma'_2, \Gamma'_{12}, \Gamma'_{25}$ -vel kompatibilis, számunkra ez kijelöl kettőt, a  $\Gamma'_2, \Gamma'_{25}$  állapotokat az előző négyből. A  $\Gamma'_{25}$  d-, a  $\Gamma'_2$  f-szimmetriájú állapot. Nem valószínű, hogy az f állapot lenne a második legmagasabb energianívó a  $\Gamma$ -ban, ezért feltehetjük, hogy ez nem más, mint a  $\Gamma'_{25}$ . Ez így megszabja a  $W$ -ból induló  $\Sigma_1, \Sigma_2$  állapotok közül azt, hogy  $\Sigma_2$  tartozzék az alacsonyabb energiához.

3.7. TÁBLÁZAT

Az energianívók jele		Szim.	Szabad el. energiák	Altmann sejtes m.	Harrison egyszerű psz. pot.	LMP (3, 1, 7) képlet
Altmann	B. S. W.					
$W_{B_2}$	$W'_2$	p, d	0,4556	0,3360	0,4886	0,3472
$W_{A_1}$	$W'_3$	d, p		0,5566	0,4166	0,4006
	$W'_1$	S, d			0,5006	0,5371
$L_{A1g}$	$L_1$	p D, d	0,2660	0,2348	0,2663	0,2469
$L_{A2n}$	$L'_2$	p		0,3673	0,2657	0,2606
$K_{A_1}$	$K_1$	s, p	0,3990	0,3749	0,3981	0,3234
$K_{B_2}$	$K_1$	s, p		0,4432	0,4379	0,3865
	$K_3$	p, d		0,	0,3600	0,3895
$X_{A1g}$	$X_1$	s, d	0,3546	0,2577	0,3936	0,2822
$X_{B2g}$	$X_4$	p		0,3964	0,3156	0,3693
	$X_3$	d				0,4659
Fermi-energia			0,3440	0,375	0,3440	0,330

A kalcium fém elektronjainak energiái a BZ szimmetriapontjaiban. A táblázat első két oszlopa tartalmazza Altmann, Cracknel (1964), ill. Bouckaert, Smoluchowski, Wigner (1936) jelöléseit az egyes állapotokra vonatkozóan, majd feltüntetjük az egyes állapotok közelítő s-p-d jellegét, majd a szabad elektron közelítés energiáit. Ezt követik Altmann és Cracknell eredményei (1964, magánközlés), majd az egyszerű Harrison (1963) modellből számítható energiaértékek és végül az utolsó oszlopban a disszertáció eredményei. Minden energiaérték a  $\Gamma_1=0$  nívóhoz viszonyítva, rydbergekben van megadva.

A 3.7. táblázatban összefoglalva bemutatjuk a lapon centrált köbös kalcium fém  $\varepsilon(k)$  energiaspektrumának a szimmetriapontokban felvett értékeit, feltüntetve az egyes állapotok közelítő s-p-d jellegét is (Callaway, 1964, 24 oldal). Összehasonlításképpen a táblázat tartalmazza a szabad elektron közelítésből a Harrison (1963)-féle egyszerű pseudopotenciális közelítésből és az Altmann—Cracknell (1964)-féle sejtes (cellulár) módszerrel számolt (ez utóbbi eddig még publikálatlan) eredményeket is.



### 3.4. Az energiaspektrum függése az atomi térfogattól, a stroncium és bárium fémek sávszerkezete

Mint majd az 5. fejezetben részletesen is ismertetjük a kalcium, stroncium és bárium fémek elektromos ellenállása nagy nyomások alkalmazása esetén a „normális” fémektől eltérően rendellenes tulajdonságokat mutat, mely nem értelmezhető e fémekről alkotott „erős kötés” (tight binding), a vezetési sávoknak az egyszerű s-p jelleget tulajdonító közelítés segítségével. Érdemesnek látszik ezért megvizsgálni azt a kérdést, hogyan változik e fémek elektromos sávszerkezete a csökkenő atomi térfogat — vagyis a növekvő hidrosztatikai nyomás függvényében. Minthogy az előző fejezetben leírt programunk majdnem teljesen automatikusan szolgáltatja a kalcium fém energiaspektrumát az atmoszférikus nyomáshoz tartozó  $\Omega = \Omega_0$  atomi térfogatra, a felvetett kérdés megvizsgálása érdekében csak a bemenő paraméterek megváltoztatására és a számolások egyszerű megismétlésére van szükség.

A gépi idő csökkentése végett azonban bevezettünk egy újabb közelítést, nevezetesen azt, hogy a (3.1.6)-ban szereplő másodrendű korrekcióban, a mátrixelemekben szereplő  $I(q)$  tagokat elhagytuk. Erről ismeretes (lásd pl. III-ban), hogy a nagyobb abszolút értékű  $G$  vektorok esetében, melyek a  $\Sigma$  többségében fellépnek, már teljesen elhanyagolhatóak. Az így módosított  $H_{ij}(k)$  energiamátrixszal megismételtük az előző fejezetben megbeszélt számításokat a kalcium fémre, változtatva az atomi térfogat értékét úgy, hogy  $\Omega/\Omega_0$  az 1; 0,9; 0,8; 0,7; 0,6; 0,4 értékeket vette fel. A meglehetősen nagy mennyiségű a 3.6a)—3.6c) táblázatokkal megegyező formában

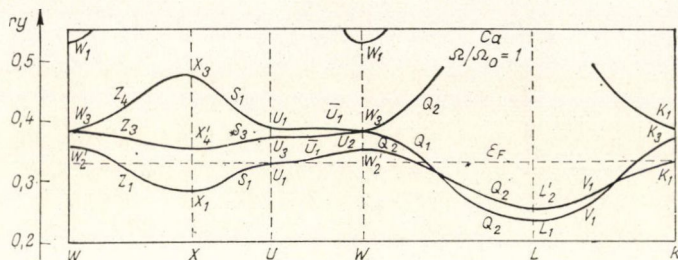
3.8. TÁBLÁZAT

Relatív atomi térfogat, $\Omega/\Omega_0$	1	0,9	0,8	0,7	0,6	0,4
Rácsparaméter	10,5	10,2	9,79	9,36	8,89	7,77
$\Gamma_1$ (s)	-0,0086	-0,0095	-0,0103	-0,0111	-0,0119	-0,0141
$\Gamma_{25}$ (d)	0,8961	0,9457	1,0033	1,0714	1,1549	1,4388
$X_1'$ (s, d)	0,2880	0,2927	0,2954	0,2954	0,2900	0,2454
$X_4'$ (p)	0,3500	0,3802	0,4188	0,4692	0,5381	0,7859
$X_3$ (d)	0,4705	0,4862	0,5037	0,5238	0,5488	0,6660
$K_1$ (s, p)	0,3276	0,3394	0,3522	0,3655	0,3788	0,3974
$K_3$ (p, d)	0,3707	0,3993	0,4292	0,4571	0,5426	0,7614
$K_1$ (s, p)	0,3853	0,4057	0,4350	0,4810	0,4928	0,6299
$W_2'$ (p, d)	0,3552	0,3662	0,3781	0,3909	0,4046	0,4327
$W_3$ (d, p)	0,3872	0,4125	0,4436	0,4830	0,5351	0,7262
$W_1$ (s, d)	0,5347	0,5794	0,6312	0,6926	0,7671	0,9904
$L_1$ (s, d)	0,2362	0,2478	0,2600	0,2722	0,2840	0,3025
$L_2$ (p)	0,2535	0,2732	0,2987	0,3328	0,3806	0,5581
Fermi-energia $\varepsilon_F$	0,3300	0,3418	0,3555	0,3717	0,3913	

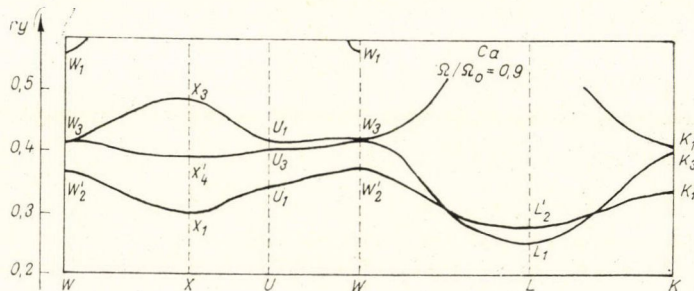
A fcc kalcium fém energianívói a BZ szimmetriapontjaiban, és az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia az atmoszférikus nyomáshoz viszonyított  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogat függvényében. A rácsparaméter atomi egységeken, az energiaértékek rydbergekben vannak megadva.



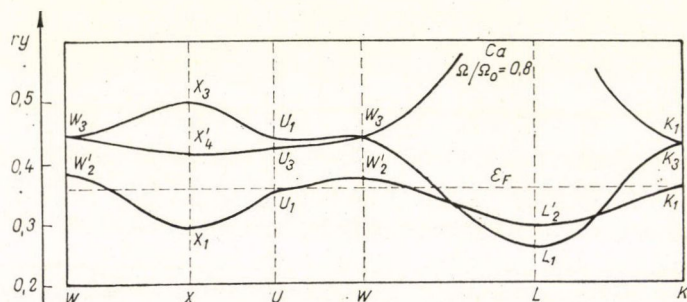
nyert eredményeket helykímélés miatt nem mutatjuk be, csupán a 3.8. táblázatban közöljük az egyes fontosabb szimmetriapontokban kapott eredményeket és a 3.6—3.11. ábrákon mutatjuk be az  $\varepsilon(k)$  spektrumot. Az  $\varepsilon_F$  Fermi-energiák meghatározására a 4. fejezetben visszatérünk. A 3.11—3.14. ábrákon külön is bemutatjuk az



3.5. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Ca-ra atmoszférikus nyomáson,  $\Omega/\Omega_0 = 1$



3.6. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Ca-ra,  $\Omega/\Omega_0 = 0,9$ .

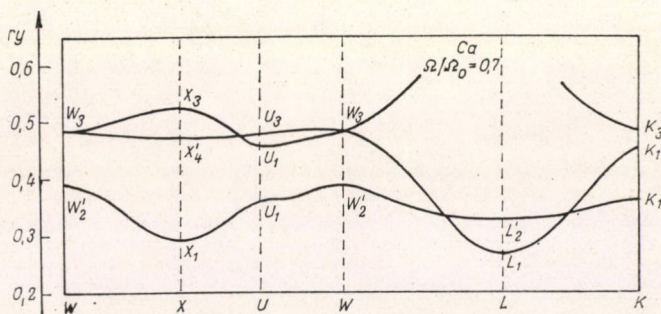
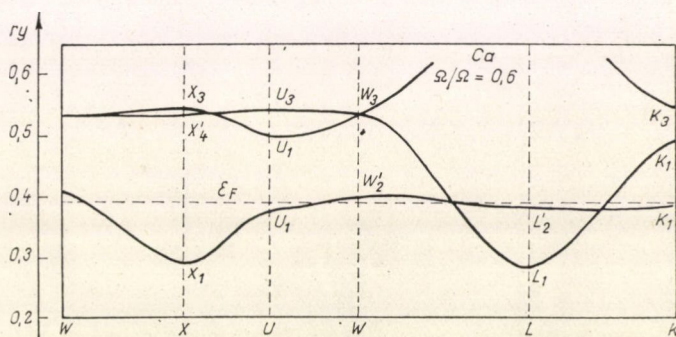
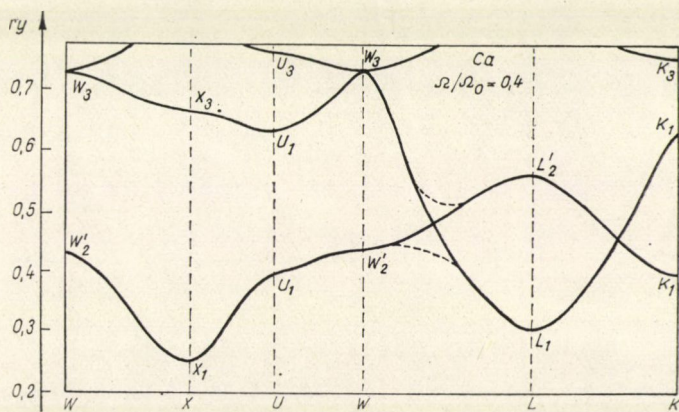


3.7. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Ca-ra,  $\Omega/\Omega_0 = 0,8$

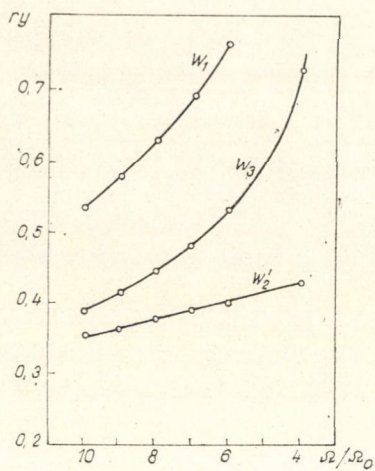
egyes szimmetriapontokbeli energiaértékek függését az  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogattól.

Összehasonlításképp számításokat végeztünk a stroncium és bárium fémekre is. A stroncium atmoszférikus nyomáson ugyancsak a lapon centrált köbös rendszerben kristályosodik, így ugyanaz a program, mely a kalciumra végezte el az előzőekben

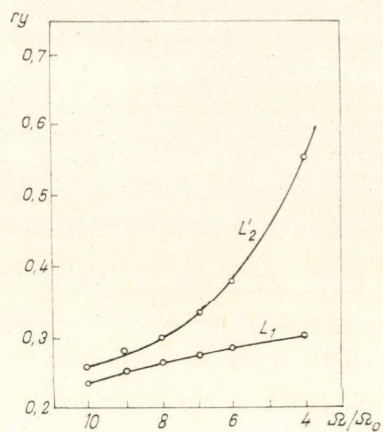


3.8. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Ca-ra,  $\Omega/\Omega_0=0,7$ 3.9. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Ca-ra,  $\Omega/\Omega_0=0,6$ 3.10. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Ca-ra,  $\Omega/\Omega_0=0,4$

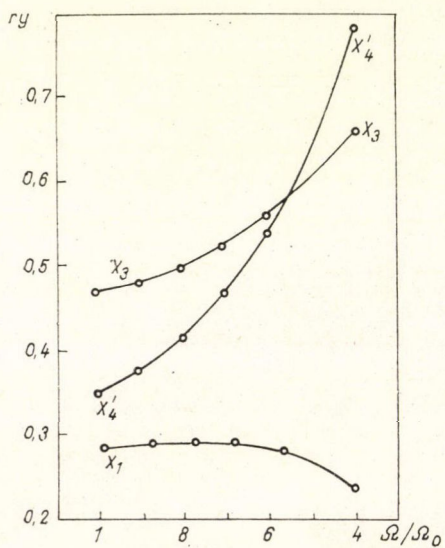




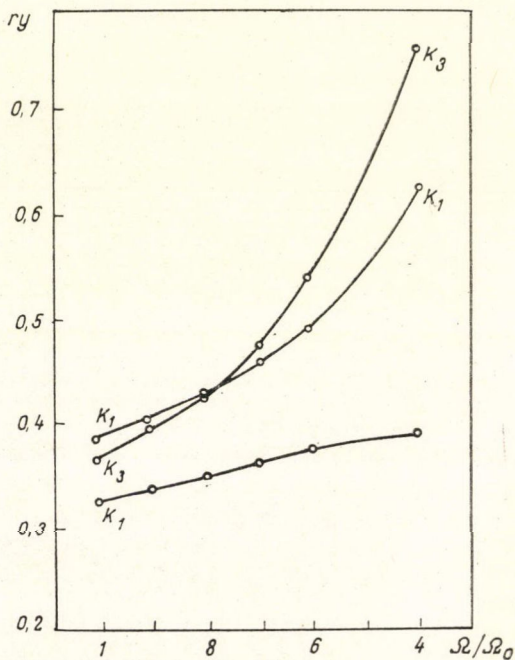
3.11. ábra. A fcc Ca W-pontbeli energianívóinak függése az  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogattól



3.12. ábra. A fcc Ca L-pontbeli energianívóinak függése az  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogattól



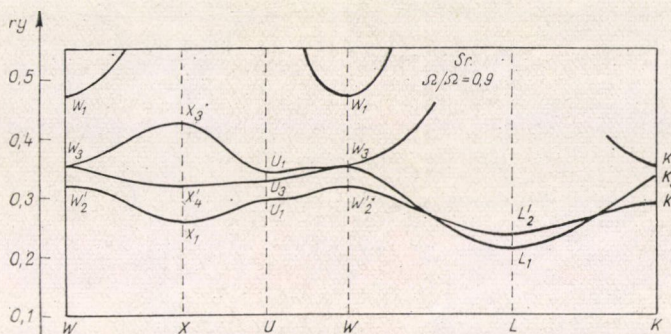
3.13. ábra. A fcc Ca X-pontbeli energianívóinak függése az  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogattól



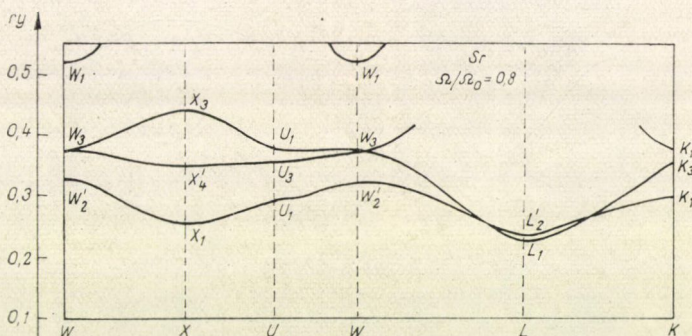
3.14. ábra. A fcc Ca K (és U)-pontbeli energianívóinak függése az  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogattól



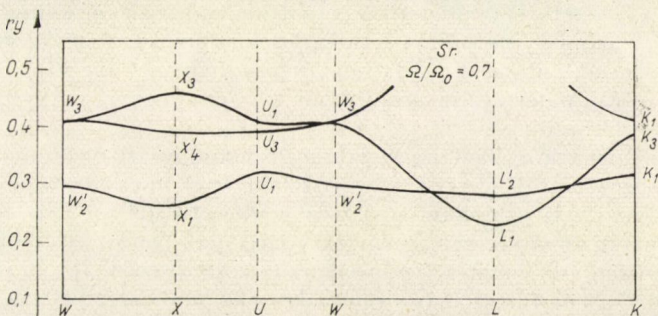
vázolt numerikus munkát, alkalmas a stronciumra is, mindössze a kalcium geometriai adatait és a LMP bemenő paramétereit kellett a stronciuméval helyettesíteni (lásd a 2.2. táblázatot). A stronciumra vonatkozó eredményeket foglaltuk össze a 3.9. táblázatban és a 3.15—3.19. ábrákon.



3.15. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Sr-ra közel atmoszférikus nyomáson  $\Omega/\Omega_0=0,9$

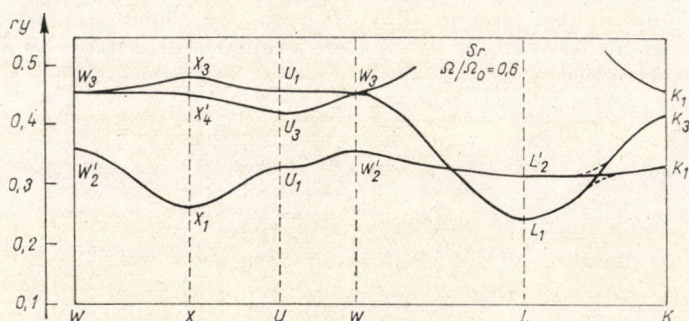


3.16. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Sr-ra,  $\Omega/\Omega_0=0,8$

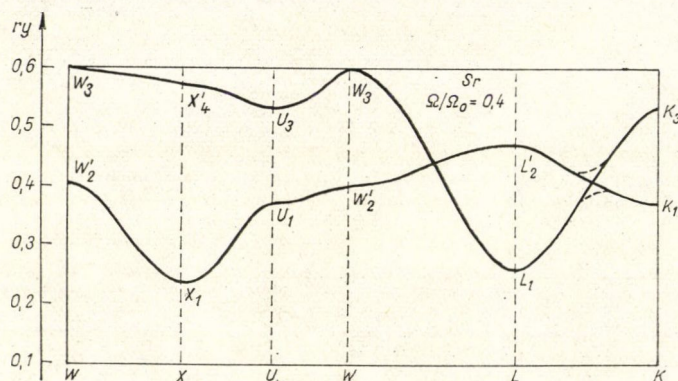


3.17. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Sr-ra,  $\Omega/\Omega_0=0,7$





3.18. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Sr-ra  $\Omega/\Omega_0=0.6$ . Az LK egyenes mentén a szaggatott és kihúzott vonalakkal jelölt mindkét lehetőség a számítások hibahatárán belül van

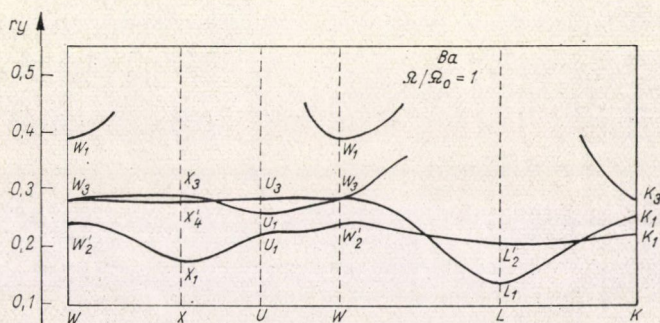


3.19. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék a fcc Sr-ra,  $\Omega/\Omega_0=0.4$ . Az LK egyenes mentén a szaggatott és kihúzott vonalakkal jelölt mindkét lehetőség a számítások hibahatárán belül van

A bárium atmoszférikus nyomáson a térben centrált köbös rendszerben kristályosodik, ennek ellenére egy hipotetikus lapon centrált bárium fémre is végeztünk számításokat az azonos struktúrájú kétvegyértékű fémek sáv szerkezetében esetleg jelentkező tendenciák felismerése céljából. Itt azonban csak az atmoszférikus nyomáshoz tartozó atomi térfogatra számoltunk. Az eredmények a 3.10. táblázatban és a 3.20. ábrán láthatók.

Tekintettel arra, hogy a lapon centrált kalcium és stroncium nyomás alatt valószínű a térben centrált szerkezetet veszik fel (Drickamer, 1965) és mint említettük, a bárium már atmoszférikusán is ilyen szerkezetű, felmerül a térben centrált szerkezetre vonatkozó sáv szerkezetek megvizsgálásának igénye. A számítások alapja ugyanaz a módszer volt, mint a lapon centrált rács esetében. Így most is a (3.1.6) energiamátrixot használtuk, a másodrendű korrekciónak az értékét a BZ  $N$  pontjában választottuk. Természetesen a reciprok rácsvektorok (3.1.3), ill. (3.1.4) rendszere helyett is mást kellett használnunk. Tekintettel arra, hogy kiindulópontnak az





3.20. ábra. Az  $\varepsilon(k)$  energiagörbék egy hipotetikus fcc Ba-ra atmoszférikus nyomáson

$N$  pontot választottuk, és itt a legalacsonyabb két energiaértéket a szabad elektron közelítésben a hat (ismét  $2\pi/a=1$  egységekben)

$$\begin{aligned}
 G_1 &= (0, 0, 0) & G_4 &= (0, -1, -1) \\
 G_2 &= (-1, -1, 0) & G_5 &= (-1, 0, 1) \\
 G_3 &= (0, -1, 1) & G_6 &= (-1, 0, -1)
 \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

3.9. TÁBLÁZAT

Relatív atomi térfogat, $\Omega/\Omega_0$	0,9	0,8	0,7	0,6	0,4
Rácsparaméter	11,10	10,7	10,2	9,70	8,47
$\Gamma_1$ (A)	-0,0094	-0,0113	-0,0114	-0,0119	-0,0112
$\Gamma_{25}$ (d)	0,8078	0,8598	0,9225	0,9997	1,2425
$X_1$ (s, d)	0,2575	0,2577	0,2641	0,2629	0,2372
$X'_4$ (p)	0,3192	0,3499	0,3923	0,4495	0,5704
$X_3$ (d)	0,4282	0,4431	0,4617	0,4848	0,6591
$K_1$ (s, p)	0,2974	0,2961	0,3214	0,3346	0,3710
$K_3$ (d, p)	0,3377	0,3617	0,3902	0,4217	0,5305
$K_1$ (s, p)	0,3438	0,3808	0,4059	0,4581	0,6600
$W'_2$ (p, d)	0,3216	0,3227	0,3447	0,3585	0,4004
$W_3$ (d, p)	0,3522	0,3717	0,4119	0,4590	0,6172
$W_1$ (s, d)	0,4692	0,5218	0,5643	0,6266	0,8162
$L_1$ (s, d)	0,2069	0,2339	0,2300	0,2421	0,2622
$L_2$ (p)	0,2336	0,2377	0,2816	0,3204	0,4695

3.10. TÁBLÁZAT

Relatív atomi térfogat, $\Omega/\Omega_0$	1
Rácsparaméter	11,93
$\Gamma_1$ (s)	-0,0223
$\Gamma_{25}$ (d)	0,7345
$X_1$ (s, d)	0,1726
$X'_4$ (p)	0,2802
$X_2$ (d)	0,2857
$K_1$ (s, p)	0,2215
$K_3$ (p, d)	0,2840
$K_1$ (s, p)	0,2555
$W'_2$ (p, d)	0,2395
$W_3$ (d, p)	0,2799
$W_1$ (s, d)	0,3850
$L_1$ (s, d)	0,1376
$L_2$ (p)	0,2066

Egy hipotetikus fcc bárium fém energianívó a BZ szimmetriapontjaiban atmoszférikus nyomáson. A rácsparaméter atomi egységekben, az energiaértékek rydbergekben vannak adva.

A fcc bárium fém energianívói a BZ szimmetriapontjaiban az atmoszférikus nyomáshoz viszonyított  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogat függvényében. A rácsparaméter atomi egységekben, az energiaértékek rydbergekben vannak megadva.



## 3.11. TÁBLÁZAT

Relatív atomi térfogat, $\Omega/\Omega_0$	L
Rácsparaméter	9,466
$\Gamma$	-0,0272 0,6794
$H$	0,2017 0,3534 0,4656 0,5058
$N$	0,1446 0,2161 0,4078 0,5776
$P$	0,2159 0,2456 0,2751 0,3485

Tájékoztató számítások eredményei a fcc bárium fém elektronjainak energianívóira a BZ szimmetriapontjaiban atmoszférikus nyomáson. A rácsparaméter atomi egységekben, az energianívók rydbergben vannak adva. A számértékek a H pontban csak igen durva eredményeknek tekinthetők.

látszik, nem elegendő.

volna figyelembe venni, így ezek járuléka nem terhelte volna a másodrendű közelítés

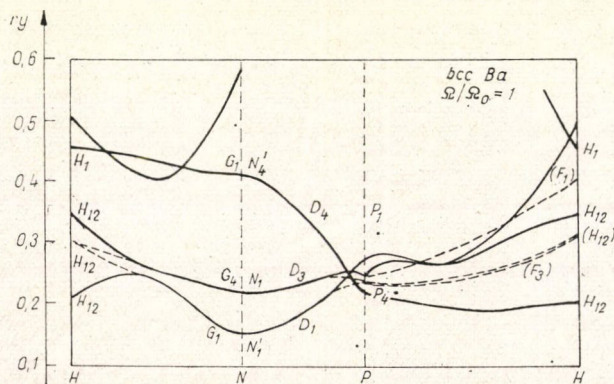
vektor szolgáltatja, azért ezeket választottuk a  $G_i$  vektorok gyanánt. A másodrendű korrekció  $G$  vektorai a

$$(1, 1, 0) \quad (2, 0, 0) \quad (2, 1, 1)$$

$$(3, 1, 0) \quad (2, 2, 2) \quad (3, 2, 1) \quad (3.4.2)$$

típusú vektorok voltak, kivéve a (3.4.1)-ben már felhasználtakat. Így összesen 134 reciprok rácsektort használtunk, de az elsőrendben figyelembe vett vektorok (síkhullámok) száma most csak 6 volt.

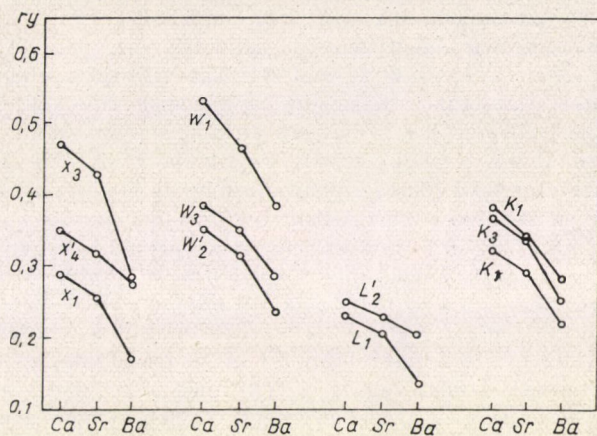
Mindazon számításokat, melyeket a három fém lapon centrált módosulataira végeztünk, megismételtük a térben centrált szerkezetre is. A kiinduló, azaz az atmoszférikus nyomáshoz tartozó atomi térfogatokat azonosaknak tekintettük mindkét rácsszerkezetre (a rácsparaméterek így természetesen nem egyeznek meg az azonos atomi térfogatú elemi celláknál). A nyert eredmények azonban több szempontból nem kielégítőek. A  $\Sigma$ -ban szereplő másodrendű korrekciók most nagyobbak adódtak, mint a lapon centrált rács esetében és így már károsan éreztette hatását a korrekciók nem teljes szimmetriája az  $i, j$  indexekben. Ennek oka az a közelítés, hogy a perturbációszámítással kapott (C.12) formulában a kiszámítandó  $E$  energiát a szabad elektron közelítésnek megfelelő  $(k + G_i)^2$  energiákkal helyettesítettük. A térben centrált köbös rács esetében több energia esik egymáshoz viszonylag közel az  $N$  pontban, amelyek közül csupán a legalacsonyabb kettőnek a figyelembevétele úgy Ez azt jelenti, hogy elsőrendben több síkhullámot kellett volna figyelembe venni, így ezek járuléka nem terhelte volna a másodrendű közelítés



3.21. ábra. A térben centrált Ba közelítő  $\varepsilon(k)$  görbéi atmoszférikus nyomáson. A szaggatott vonallal kihúzott részek a különben hibásan számított eredmények helyett berajzolt valószínű sejtéseket jelentik



$\Sigma$ -ját, azaz ezzel csökkent volna ennek numerikus értéke. E módosítások figyelembevételére azonban időhiány következtében már nem kerülhetett sor, ezért a kapott előzetes eredmények közül csak egyet, a tércentrált, atmoszférikus nyomáshoz tartozó bárium fémre vonatkozót mutatjuk be a 3.11. táblázatban és a 3.21. ábrán.



3.22. ábra. A szimmetriapontokbeli energiaértékek változása az atmoszférikus nyomású kalcium, stroncium, bárium sorozatban. Minden energiaérték a közös szintre hozott  $\Gamma_1$  nivóra vonatkozik

Látható, hogy azon nívók is, amelyeknek egyébként szimmetria okok miatt degeneráltaknak kellene maradniuk, a  $\Sigma$ , és ezen keresztül a  $H_{ij}$  aszimmetriája következtében felhasadtak. Így a kapott energiaspektrum hibája legalább 0,1 ry. Mégis, némi támpontot nyújt a két rácsszerkezethez tartozó energiaspektrumok összehasonlítására, mint arra a következő 3.5. fejezetben rátértünk.

### 3.5. A sávstruktúrák értékelése

Az előző fejezetekben meghatározott energiaspektrum magában is mutat néhány érdekes vonást, amit célszerűnek látszik már most megemlíteni, mielőtt továbbmennénk olyan további fizikai jellemzők meghatározására, melyek felhasználják az  $\varepsilon(k)$  görbéket.

Mindenek előtt a kétvegyértékű fémek sávok szerkezetének alapvető vonása az, hogy a két legalsó vezetési sávnak át kell fednie egymást. Ezt a tulajdonságot mindhárom fém számított sáv szerkezete mutatja. Atmoszférikus nyomáson az első sáv legmagasabb energiaértéke,  $W'_2$  magasabban fekszik mint a második sáv legalacsonyabb nívója, az  $L_2$ . E két nívó közötti energiakülönbség, a két sáv átfedése a kalcium esetében 0,10 rydberg (a pontosabb modell szerint 0,077 rydberg). Ez az átfedés csökkenő atomi térfogattal — azaz növekvő nyomással — csökken, alapját adva annak a kísérleti ténynek, hogy a kalcium fémes tulajdonságai romlanak növekvő nyomással. Általában az energiasávok felhasadása, az energia „rés” minden pontban növekszik növekvő nyomással, mindvégig megmarad azonban a  $WL$ , a  $KL$



egyenesek, és minden bizonnyal a teljes hexagonális lapon is a véletlen degenerancia, mely a  $W$  és  $L$  pontokbeli energianívók növekvő nyomással változatlan sorrendjének a következménye. Érdeemes megjegyezni, hogy az  $X$  pontban a második és harmadik energianívó az  $X'_4$  és  $X_3$  sorrendje kb.  $\Omega = 0,6 \Omega_0$  atomi térfogatnál felcserélődik. Hasonló cserét láthatunk a  $K$  pontban is, ugyancsak a második, a  $K_3$  nívó kb.  $\Omega = 0,8 \Omega_0$ -nál a harmadik, a  $K_1$  fölé emelkedik. Mint látható,  $\Omega = 0,6 \Omega_0$ -nál a  $K$  pontbeli csere már megtörtént, de az  $X$ -beli még nem. A kompatibilitási relációk szerint azonban  $X'_4$  csak  $K_3$ -mal  $X_3$  csak  $K_1$ -gyel köthető össze. Így az  $XK$  egyenes mentén a második és harmadik sávnak metszenie kell egymást, véletlen degenerációnak kell fellépnie. Ezt a pusztán szimmetriaokok miatt következő állítást a konkrét numerikus értékek szépen követik (lásd 3.8—3.9. ábrát).

A vizsgált kétvegyértékű fémek szabad atomjainak közös sajátága, hogy a legkülső, lezárt  $s \cdot p$  héjakon kívül két  $s$ -elektront tartalmaznak a következő héjban. A periódusos rendszer soronkövetkező elemeinél azonban az előző héj  $d$  nívói (a kalcium után az átmeneti fémek  $d$  nívói) kezdenek betöltődni. A fémes állapotban ez úgy jelentkezik, hogy a  $d$  nívóból kialakuló  $d$  sáv növekvő szerepet játszik. A  $d$  sáv jelenléte szembeötlően észrevehető, ha összehasonlítjuk az energianívók sorrendjét olyan anyagok sávos szerkezetével, ahol a sáv  $d$ -jellege világos. Ilyen például az argon  $d$ -sávja (Mattheiss, 1964) vagy a réz (Burdick, 1963) és a vas (Wood, 1962)  $d$  sávjai. Különösen érdekes a BZ felületén fekvő élek mentén a helyzet, melynek pontjaiban az energiaértékek éppen a két vezetési sáv átfedésének tartományába, vagy annak közelébe esnek. (Lásd 3.4. és 3.5. ábrát). Az  $L_1$ ,  $X_1$  nívók  $s$  és  $d$ -jellegűek, az  $L'_2$ ,  $X'_4$   $p$ -jellegűek, a  $W'_2$   $p$ - és  $d$ -, az  $X_3$   $d$ -jellegű stb. Miközben például a  $W$  pontból az  $X$  felé megyünk a  $p$ — $d$ -jellegű  $W'_2$  nívóból induló alsó sávban az energia-állapotok szimmetriája  $s$ — $d$ -jellegűvé válik, mire  $X_1$ -be érünk. A  $W_3$  nívó,  $d$ ,  $p$  szimmetriája  $X'_4$ -be érve  $p$ ,  $X_3$ -ba érve  $d$ -jellegűvé változik. További jellemző a  $d$  sávokra az, hogy a  $W_1$  nívó jelentősen föléje emelkedik a  $W'_2$ ,  $W_3$  nívóknak. Mindezek arra mutatnak, hogy a különböző szimmetriájú állapotoknak egy erős hibridizációjával állunk szemben, és a kevert  $d$ ,  $p$  sávoknak az  $s$  sávval való átfedése felelős a kalcium, stroncium és bárium fémes sajátágaiért.

Ha nő a nyomás, azaz csökken a szomszédos atomok közötti távolság, akkor az atomi  $d$ -állapotok átfedése is növekszik. Ebből arra következtethetünk, hogy a  $d$  sávok szerepe növekszik a nyomás növekedtével. Ezt világosan mutatja az a tény, hogy a  $d$ -szimmetriájú  $X_3$  állapot süllyed a csökkenő atomi térfogattal, sőt kevéssel  $\Omega/\Omega_0 = 0,6$  után az  $X_3$  és  $X$  nívók, azaz a  $d$  és  $p$  nívók felcserélődnek, növelve a Fermi-felület közelébe eső elektronok  $d$ -jellegét.

Ugyancsak érdekes következtetés vonható le, ha az atmoszférikus nyomáshoz tartozó sáv szerkezeteket hasonlítjuk össze a Ca-tól a Sr-on át a Ba felé haladva. Az általános pseudopotenciál formalizmusból következik, hogy a pseudopotenciál gyenge azokra az  $s$ ,  $p$ , ... állapotokra, amelyeknek megfelelő  $s$ ,  $p$ , ... szimmetriájú állapot létezik a törzsben, mert ezek az állapotok azok, amelyek kiegyenlítik a Coulomb potenciál erős vonzó jellegét. A Ca  $3d$  vezetési sávjához azonban nincs a törzsben megfelelő  $d$  állapot, így ez a kiegyenlítőds nem lép fel, a Ca  $3d$  sávja viszonylag erősen kötött, keskeny sáv. Ugyanez a kép az ortogonalizált síkhullámok módszerénél úgy szemlélhető, hogy a Ca-nál nincsenek a törzsben  $d$  állapotok, amelyre ortogonalizálni kellene a vezetési elektronok állapotfüggvényét, a  $d$  állapotú vezetési elektronok Hamilton operátora az ortogonalizálás következtében nem változik. A Sr és Ba  $4d$ ,  $5d$  vezetési elektronjainál már más a helyzet, ott már megtalálhatók



a törzsben is  $d$  állapotok, így az ortogonalizálás révén lehetőség nyílik az erős Coulomb potenciál nagymértékű semlegesítésére, ami ismét a  $4d$ ,  $5d$  állapotok kiszélesedésére, azaz a  $d$  jelleg fokozott felléptére vezet. A 3.23. ábrán az  $X_3$  nivó süllyedése az  $X'_4$ -hez képest, az  $L'_2 - L_1$  felhasadás növekedése e jelenséget szemléletesen igazolják. Csupán megemlítjük, hogy ugyanez a fizikai alapja a Li és Na sáv szerkezetében levő különbségnek is, ahol a Li törzsben a  $p$  nivók hiányzanak, azért a Li  $2p$  sávja sokkal erősebben kötött, mint a Na  $3p$  sávja. (Cohen és Heine, 1958.)

Az összes fémek az átmeneti fémek sorozatának elején (titán, vanádium stb.) a térben centrált köbös rendszerben kristályosodnak. Ugyanezen fémeknél egyben a  $d$  állapotok szerepe is mind jelentősebb, hiszen egyre több elektron kerül a  $3d$  sávba. Az előzőekből azt váránk, hogy akkor a három általunk vizsgált fém a Ca, Sr, Ba esetében is a sávok  $d$ -jellegének erősödésével egyre növekszik a tendencia a lapon centrált rácsról a tércentráltra való áttérése. Valóban a Sr fázisátmenetéről, mely már viszonylag kis nyomáson létrejön, minden valószínűséggel állítható, hogy az éppen egy lapon centrált-tércentrált átmenet (McWhan és Jayaraman, 1963). A Ba viszont már atmoszférikus nyomásnál is térben centrált. Sejtésünk tehát az, hogy a  $d$  sáv növekvő szerepe okozza a fémekben a térben centrált rácsra való átmenet tendenciáját. Ebből egyébként az is következik, hogy a Ca 63 kbar nyomásnál kísérletileg talált fázisváltozásánál a fellépő új, eddig még ismeretlen struktúra valószínű a térben centrált rács.

#### 4. A kalcium fém Fermi-felülete

A Fermi-felület az  $\varepsilon(k) = \text{konst.}$  egyenletű térbeli felületek közül az, amelyik a  $\text{konst} = \varepsilon_F$  Fermi-energiához tartozik. Így elsősorban az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia meghatározása a feladat.

Kétvegyértékű fémek esetében az első BZ-ban éppen annyi állapot található, amennyi a fém vezetési elektronjainak a száma. A sáv szerkezetre ránézve azonban (3.6. ábra) rögtön látszik, hogy az elektronok számára energetikailag kedvezőbb, ha nem töltik be az első zóna viszonylag magas energiájú pontjait az origótól leg-távolabb levő  $W$  sarokpont környékén, mikor a második sávban az  $L$  pont körül alacsonyabb energiájú állapotba is kerülhetnek. Így természetes, hogy lyukakat várunk legalább is a  $W$  pont körül az első zónában, és elektronokat az  $L$  pont körül a második zónában. Nyilvánvaló, hogy ahány állapot maradt üresen az első zónában, ugyanannyi állapotnak kell betöltődnie a másodikban. Mivel a  $k$ -térben az állapotok száma arányos az elfoglalt térfogattal, ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy az elektronok által betöltött térfogatnak a második zónában meg kell egyeznie az elektronok által üresen hagyott térfogattal az első zónában. Ez a feltétel rögzíti a Fermi-energia értékét. A feladat tehát geometriai jellegű: az elektronok, illetve lyukak által elfoglalt térfogatokat kell meghatározni a  $k$ -térben. Ehhez, de később a ciklotron tömegek meghatározásánál is szükségünk lesz a konstans energiájú felületek geometriai alakjának ismeretére.

Látni fogjuk, hogy az energiaparaméter igen kicsiny változása a konstans energiájú felületek alakjának lényeges megváltozását vonja maga után. Tekintettel a számított energiaspektrum kb. 0,01 ry-nyi pontosságára, ennél csak kisebb pontosságot várhatunk az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia értékére. Mivel ez nem elegendő a Fermi-felület alakjának pontos meghatározásához, e téren fel kell adnunk azt az elvet,



hogy tisztán számításokból kiindulva határozzuk meg a Fermi-felületet, és a kísérleti adatokhoz kell fordulnunk további támpontokért. Mivel a kalciumra vonatkozó kísérleti adatok száma meglehetősen csekély, és az is csak kevés információt nyújt, az e fejezetben a Fermi-felület alakjára vonatkozóan közölt eredmények nem tekinthetők véglegeseknek.

#### 4.1. A konstans energiájú felületek síkmetszetei

A már ismert

$$\det |H_{ij}(k) - \varepsilon(k)\delta_{ij}| = 0 \quad (4.1.1)$$

egyenlet jelenti implicit formában a konstans energiájú felületek egyenletét is. Eddig ezt az egyenletet úgy tekintettük, mint az  $\varepsilon(k)$  sajátértékeket meghatározó egyenletet. Lefixáltuk a  $k$  vektort, ehhez meghatároztuk a  $H_{ij}(k)$  energiamátrixot, majd ennek  $\varepsilon(k)$  sajátértéke jelentette a  $k$  pontban az  $\varepsilon(k)$  sajátenergiát. Most fordítva kell eljárunk, rögzítünk egy  $\varepsilon$  értéket, mondjuk  $\varepsilon_0$ -t és (4.1.1)-ből megkeressük, milyen  $k$  vektorok tesznek eleget ennek az egyenletnek. A megoldásképpen kapott vektorok az  $\varepsilon(k) = \varepsilon_0$  konstans energiájú felületen levő pontokat határozzák meg. A  $H_{ij}$  mátrixelemekre most is a  $k$ -tól függő (3.1.6) formulát használtuk a másod-

rendű tagban szereplő  $I(q)$  integrálok elhagyása nélkül. A  $G_i$ , illetve  $G$  reciprokrács vektorok gyanánt a (3.1.3), (3.1.4) rendszer szolgált.

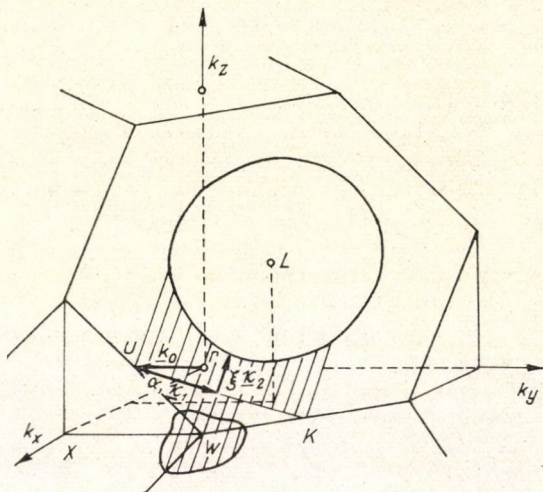
Az  $L$  pont körül található, elektronok által betöltött térfogat kontúrjainak a meghatározása az egyszerűbb feladat. Ezen elektron „csomag”-nak három síkmetszetét határoztuk meg, az  $(1, 1, 1)$  normálisú hexagonális síkkal, az  $(1, 1, 0)$  normálisú, a  $\Gamma KL$  pontokon átmenő síkkal, és az  $(1, -2, 1)$  normálisú, a  $\Gamma WL$  pontokon átmenő síkkal. Általában a  $k$  vektort a következő alakban írtuk fel

$$k = k_0 + \alpha \kappa_1 + \xi \kappa_2, \quad (4.1.2)$$

4.1. ábra. Az  $L$  körüli konstans energiájú felületek és a BZ hexagonális lapja metszészíneinek meghatározásához használt segédvektorok.  $k_0$  lefixálása után  $\alpha \kappa_1$  egyenlő lépésekben növekedett  $U$ -tól  $K$  irányában, s így az egyedüli ismeretlen paraméter a  $\xi$  volt, mely megadott a  $\kappa_2$  vektor irányában egy kereszt metszéspontot

gonális síkkal való metszeteket kerestük, akkor  $k_0$  gyanánt az  $U = (1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  pontot választottuk ( $2\pi/a = 1$  egységeken), a  $\kappa_1$  gyanánt az  $U$ -ból a  $K$ -ba mutató egységvektort, és  $\kappa_2$  gyanánt a  $W-L$  irányú egységvektort. (Lásd 4.1. ábrát.) Az  $\alpha$  pa-

ahol  $k_0$  alkalmasan választott kiindulópont,  $\kappa_1$  és  $\kappa_2$  pedig rendszerint két egymásra merőleges vektor, melyek meghatározzák azt a  $k_0$ -on átmenő síkot, melyben a konstans energiájú felület metszeteit keressük. Például, mikor a hexa-





## 4.1. TÁBLÁZAT

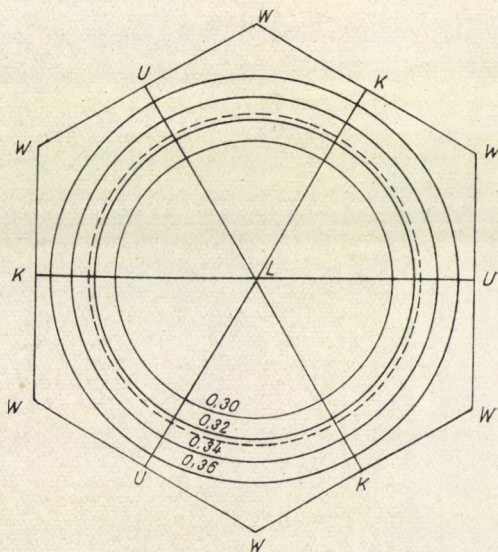
E=0,30				E=0,32			
0	0,2966	0,1402	-0,0808	0	0,2008		
1	0,2463	0,1089	-0,1098	1	0,1644		
2	0,2100	0,0854	-0,1427	2	0,1362	-0,0445	-0,0586
3	0,1830	0,0680	-0,1795	3	0,1142	-0,0371	-0,1137
4	0,1628	0,0555	-0,2202	4	0,0974	-0,0391	-0,1587
5	0,1484	0,0471	-0,2650	5	0,0852	-0,0414	-0,2031
6	0,1390	0,0420	-0,3137	6	0,0771	-0,0427	-0,2474
7	0,1343	0,0400	-0,3601	7	0,0729	-0,0428	-0,2848 -0,4384
8	0,1340	0,0410	-0,3639	8	0,0729	-0,0415	-0,2882 -0,4354
9	0,1382	0,0448	-0,3200	9	0,0762	-0,0388	-0,2544
10	0,1471	0,0516	-0,2722	10	0,0839	-0,0345	-0,2123
11	0,1611	0,0618	-0,2279	11	0,0957	-0,0286	-0,1706
12	0,1811	0,0758	-0,1879	12	0,1122	-0,0210	-0,1303
13	0,2082	0,0945	-0,1517	13	0,1341	-0,0112	-0,0915
14	0,2449	0,1190	-0,1193	14	0,1624	0,0020	-0,0549
15	0,2966	0,1507	-0,0906	15	0,1993	0,0223	-0,0232

paraméter értékei 15 egyenlő lépésközből változtak úgy, hogy közben a  $k_0 + \kappa f_{11}$  vektor a  $k_0$ -tól, jelen esetben  $U$ -tól indulva elért a  $K$  pontba. Minden egyes  $\alpha$  értéknél a  $k_0 + \alpha \kappa_1 + \xi \kappa_2$  vektort helyettesítettük (4.1.1)-be és meghatároztuk a most már egyetlen ismeretlent, a  $\xi$  paramétert. Mindezt elvégeztük az  $\varepsilon_0$  paraméter következő értékeire  $\varepsilon_0 = 0,30; 0,32; 0,34; 0,36; 0,38; 0,40$  ry. Az eredmények egy részletét közöljük a 4.1. táblázatban és a 4.2. ábrán.

A  $\Gamma WL$ -síkkal való metszet esetén  $k_0$  a  $W$ -be mutató vektor volt,  $\kappa_1$  a  $WL$ ,  $\kappa_2$  a  $\Gamma L$  irányba mutatott. A metszetek láthatók a 4.3. ábrán.

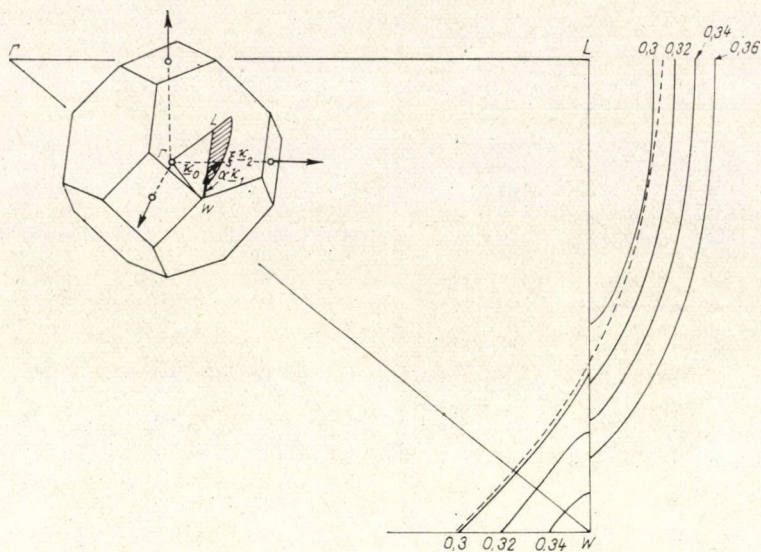
A  $\Gamma KL$  síkmetszet esetén  $K$ -körüli síkbeli polárkoordinátákat használtunk, így  $\kappa_1$   $\Gamma K$ ,  $\kappa_2$   $k_z$  irányú egységvektor volt, és ebben a rendszerben a  $\kappa = \varrho(\kappa_1 \sin \vartheta + \kappa_2 \cos \vartheta)$  vektornak változtatva a  $\vartheta$  polárszögét a  $\varrho$  hosszúságát tudtuk meghatározni. Eredmények a 4.4. ábrán láthatók.

A  $W$ -pont környékén a konstans energiájú felületeknek a  $XWK$  síkkal való metszéspontjai láthatók a 4.5. ábrán. A  $W$  pontbeli polárkoordináta-rendszert használva kerestük meg a  $W$  körüli lyukakhoz tartozó konstans energiájú felületeknek a függőleges  $(1, 1, 0)$  normálisú, majd a  $(1, 1, 1)$  normálisú metszeteit (lásd 4.6. és 4.7. ábrákat). Ez utóbbit már egyszer megkaptuk.

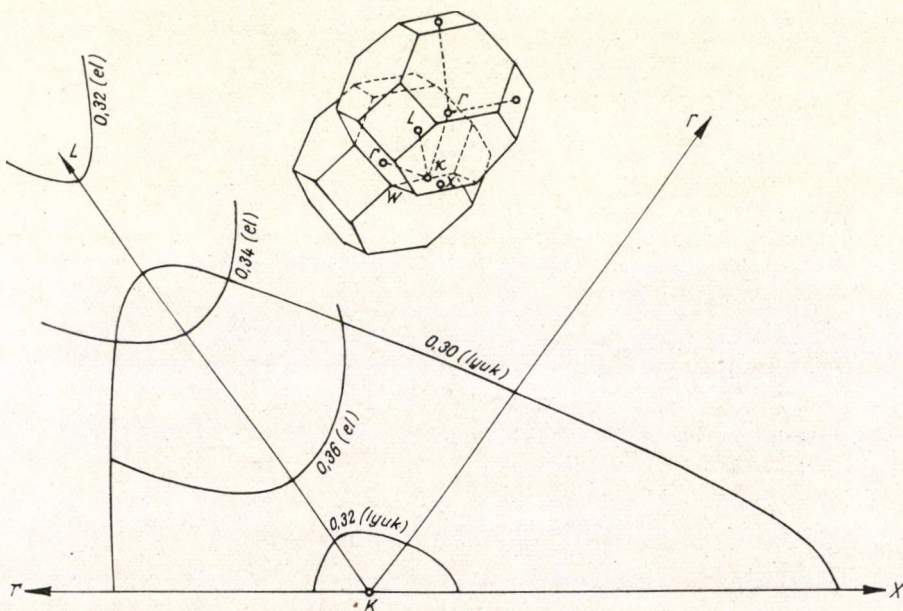


4.2. ábra. Konstans energiájú elektron-felületeknek a hexagonális síkkal való metszészvonalai. Az energiaparaméter értéke 0,30 ry és 0,36 ry között változott. A szaggatott vonal a szabad elektron Fermi-felület metszete



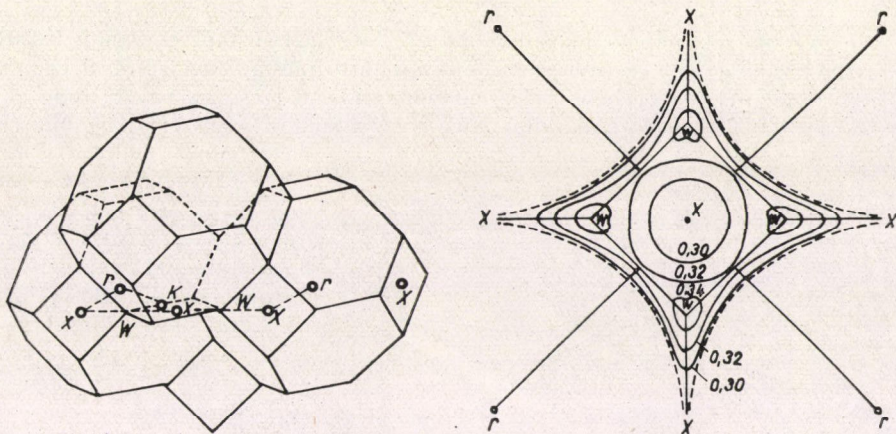


4.3. ábra. Konstans energiájú felületek metszetei a  $\Gamma$ WL síkkal. A  $k_0, k_1, k_2$  vektorok mutatják ismét a számolás menetét. Az L pont körül láthatók a második sávbeli elektron-felületek és a W pont körül az első sávbeli lyuk-felületek. A szaggatott görbe a szabad elektron Fermi-felület metszete

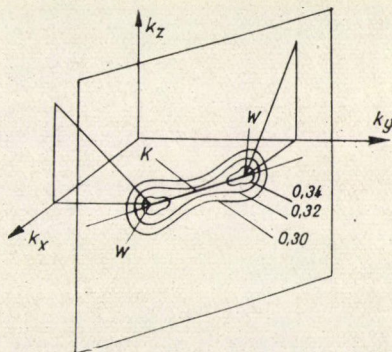
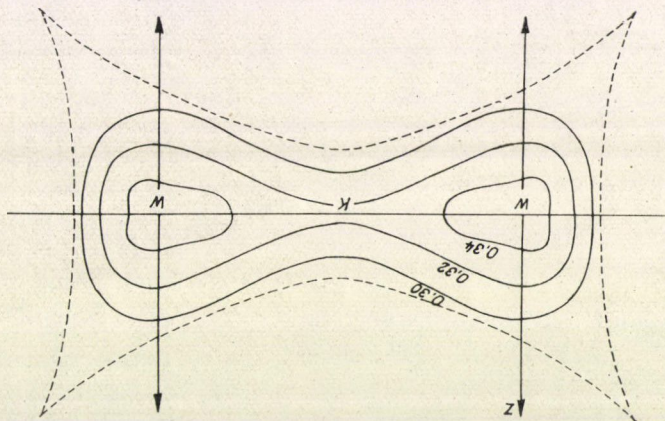


4.4. ábra. Konstans energiájú felületek a K pont körül a  $\Gamma$ KL síkban. Látható, hogy 0,34 ry-hez nem tartozik lyukfelület a K pont körül





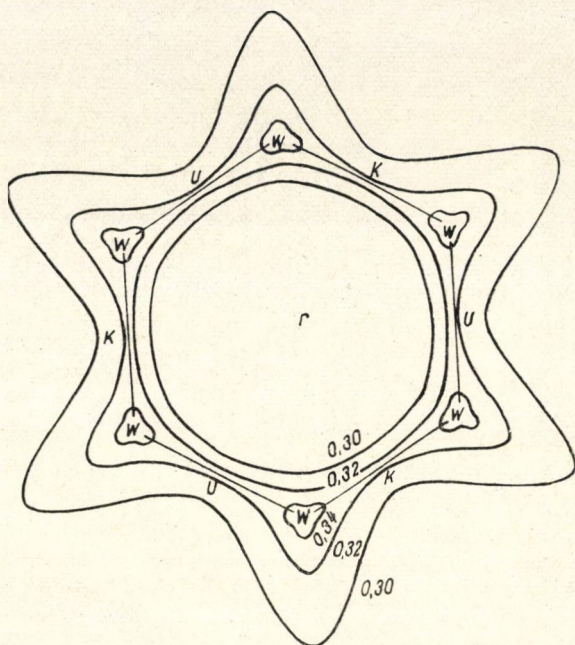
4.5. ábra. Konstans energiájú felületek a horizontális  $\Gamma XW$  síkon.  
A szaggatott vonal a szabad elektron Fermi-felület metszete



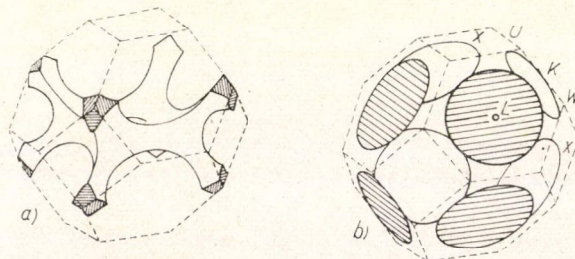
4.6. ábra. Lyuk-felületek a W pont körül a függőleges  $(1, 1, 0)$  normálisú síkban.  
A szaggatott görbe a szabad elektron Fermi-felülethez tartozó metszet



Az eredmények alapján megállapíthatjuk, hogy a konstans energiájú felületek két részből állnak, az  $L$  körüli elektronokhoz tartozó és a közel gömbsüveg alakú felületből, melynek lényegében csak a méretei változnak az  $\varepsilon_0$  paraméter függvényében, és a  $WK(U)$  körüli lyukakhoz tartozó, barlangos üregerű tartományból,



4.7. ábra. Konstans energiájú lyuk-felületek metszetei az (1, 1, 1) hexagonális síkkal



4.8. ábra. Harrison (1963) modellje a kalcium (a) az első sávhoz (lyukak) és (b) a második sávhoz (elektronok) tartozó Fermi-felületre

felületére vonatkozóan. A Harrison által adott modell megegyezik a mi számításainkból adódó, kb. 0,30 ry-hez tartozó konstans energiájú felülettel. Harrison véleménye szerint a lyukakhoz tartozó Fermi-felület az (1, 0, 0) normálisú síkon a  $W$  és  $U(K)$  pontokon átmenő összefüggő felületet, „monstrumot” alkot (lásd

illetve ennek felületéből, melynek az alakja is lényegesen függ az  $\varepsilon_0$  energiaparamétertől. Látható (lásd 4.5. ábrát), hogy a lyukak által elfoglalt térfogatrész pl. 0,34 ry esetén még csak a  $W$  pont környezetére korlátozódik, csökkenő energiaparaméterrel azonban ez az alak fokozatosan elnyúlik a  $K$  pont felé és kevéssel 0,32 rydberg előtt a lyukak már egy összefüggő „monstrumot” fognak alkotni az (1, 0, 0) normálisú  $WKX$  síkon. Ugyanez látható a 4.4. ábrán is. Ha az energiaparaméter 0,30 vagy 0,32 ry volt, még található lyukak a  $K$  pont körül, de rohamosan csökkenő térfogattal, és 0,34 ry-nél már csak az elektron felülettől származó metszet látható. Ez azt jelenti, hogy az  $\varepsilon_0 = 0,33$  ry energiaértéke körül egy  $\pm 0,01$  ry-nyi bizonytalansága Fermi-felület lyukakhoz tartozó részének alakját döntő módon befolyásolhatja. Mivel ez számításaink pontosságának is a mértéke, nyilvánvaló, hogy e kérdést számítással eldönteni nem tudjuk, és így a kísérletekből származó további információkra van szükségünk.

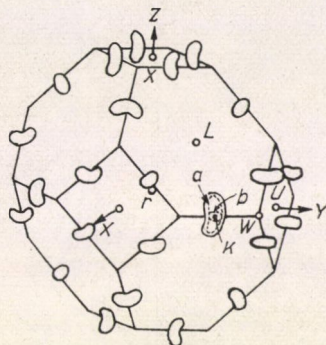
Korábban Harrison (1963) valamint Altmann és Cracknell (1964) végeztek számításokat a kalcium fém Fermi-



Harrison modelljét a 4.8. ábrán). A Fermi-felületnek elektronok által alkotott, második BZ-ben levő része ugyanúgy, mint a mi modellünkben az  $L$  pontok körül a hexagonális lapokra rátett igen közel gömbsüveg alakú „csomagokból” tevődik össze.

Altmann és Cracknell Fermi-felülete (lásd a 4.9. ábrát) abban különbözik Harrisonétól, hogy az  $(1, 0, 0)$  felületen összefüggő Fermi-felület felhasad, összehúzódik, és csak az  $U$  (és  $K$ ) pontok körül maradnak meg a vese alakú tartományok. A Fermi-felületnek a második zónába eső, az elektronokat határoló része alakjára nézve megegyezik Harrison modelljével.

A két elég eltérő modell közötti döntésnek természetes módja az lenne, hogy egyenlővé téve a lyukak és elektronok által a  $k$ -térben betöltött térfogatokat, meghatározzuk az  $\varepsilon_F$  Fermi-energiát, majd az ezen energiához tartozó konstans energiájú felületet, a Fermi-felületet. Történtek is ilyen irányú próbálkozások, melyek azonban a térfogati integrálok numerikus kiszámításának bonyolultsága miatt igen hosszadalmas számolási munkát igényeltek. Tekintettel a nyerhető eredményeknek a fentiekben már említett pontatlanságból eredő kétes értékűségére, lemondunk erről a hosszadalmas (és költséges) útról, remélve, hogy a kísérleti eredmények vizsgálatával támpontot kapunk az  $\varepsilon_F$  Fermi-energiára vonatkozóan.



4.9. ábra. Altmann—Cracknell (1964) javaslata a lyukakhoz tartozó Fermi-felületre. Az elektronfelület lényegében ugyanolyan mint Harrisoné (1963)

#### 4.2. A de Haas—van Alphen-effektus

Kísérletileg Condon és Marcus (1964) vizsgálták a kalcium Fermi-felületét a de Haas—van Alphen-effektus mérésével. Mint ismeretes (lásd pl. Ziman, 1964, 274 oldal), az elektronpályák mágneses térbeli kvantálásának következményeképpen az elektrongáz teljes energiája függ a mágneses tér erősségétől. E miatt, ahogy az egyes kvantált pályák a mágneses tér változtatásával fokozatosan áthaladnak a Fermi-nívón, a rendszer szabad energiája  $1/H$ -val változik periodikusan. ( $H$  a mágneses tér erőssége.) Ez maga után vonja több makroszkopikusan is mérhető fizikai jellemző periodikus változását, többek között a mágneses szuszceptibilitását is. Ez a de Haas—van Alphen-effektus. A periódusok  $P$  hossza közvetlen kapcsolatban van a Fermi-felületnek a mágneses tér irányára merőleges extrémális méretű  $A_0$  keresztmetszeteivel:

$$P = \frac{2\pi e}{\hbar c A_0} = \frac{2,673}{A_0} \cdot 10^{-9} \text{ Gauss}^{-1} \quad (4.2.1)$$

( $A_0$  atomi egységekben mérve). A Ca-ra vonatkozó kísérleteket sajnos, csak polikristályon tudták elvégezni, így az eredmények csak kvalitatív jellegűek. Condon és Marcus három periódust mértek, ami inkább az Altmann—Cracknell-modellt támasztja alá, mint a Harrison-félt, ez utóbbi ugyanis a várható periódusok számát 7-ben jelölte meg. Az Altmann—Cracknell-modellnél azonban túl hosszú periódusok







$L'_2$  nívó. Ebből  $0,261 \leq \varepsilon_F \leq 0,347$ . Ugyanakkor a  $K(U)$ -pontbeli, első sávbeli  $K_1$  energianívó értéke  $0,323$  ry. Így ha  $\varepsilon_F$  ennél kisebb, akkor az első sávhoz tartozó Fermi-felület alakja a Harrisonéhoz hasonlóan összefüggő karokból áll, ha  $\varepsilon_F$  ennél nagyobb, akkor e karok szétdarabolódnak  $W$  körüli barlangos üregekre. Az első sávbeli Fermi-felület így a  $\Gamma X W$  síkon összefüggő, vagy nem attól függően, hogy  $\varepsilon_F \geq 0,323$  ry.

A 4.10. ábrán feltüntettük a konstans energiájú felületeknek az  $(1, 0, 0)$ ;  $(1, 1, 0)$  és  $(1, 1, 1)$  normálisú síkokkal való metszeteinek energiafüggését, valamint a kísér-

4.1. TÁBLÁZAT  
(folytatás)

E = 0,34					E = 0,36				
0	0,1247				0	0,0576			
1	0,0953				1	0,0322			
2	0,0716				2	0,0111			
3	0,0526				3	-0,0064			
4	0,0378				4	-0,0203			
5	0,0268				5	-0,0310	-0,4263		
6	0,0194	-0,1453	-0,1559	-0,4270	6	-0,0383	-0,3601		
7	0,0155	-0,1230	-0,2090	-0,3782	7	-0,0422	-0,3190		
8	0,0151	-0,1195	-0,2143	-0,3757	8	-0,0427	-0,3164		
9	0,0184	-0,1223	-0,1818	-0,4221	9	-0,0398	-0,3553		
10	0,0252				10	-0,0334	-0,4211		
11	0,0358				11	-0,0235			
12	0,0503				12	-0,0099			
13	0,0691				13	0,0073			
14	0,0928				14	0,0284			
15	0,1224				15	0,540			

Konstans energiájú felületek metszéspontjai a BZ hexagonális lapjával. Az E energiaparaméter értékei rydbergekben vannak megadva. Az első oszlop számai 0-tól 15-ig és U és K pontok közötti ekvidisztans osztáspontokat jelentik ( $\alpha$ ). A további oszlopokban a keresett metszéspontoknak ezen egyenestől mért merőleges távolságai találhatók  $2\pi/a = 1$  egységben ( $\delta$ ). Lásd a 4.1. ábrát is.

4.2. TÁBLÁZAT

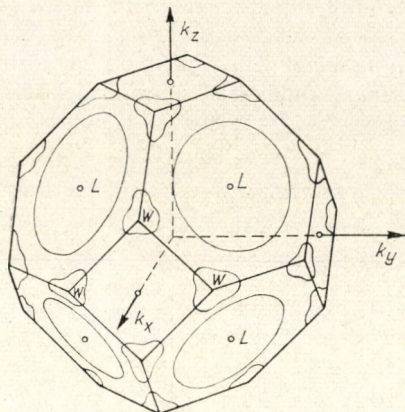
H iránya	$\varepsilon =$	0,30	0,32	0,34	0,33
(1, 1, 1)	elektron ( $\delta$ )	0,154	0,115	0,091	0,104
(1, -2, 1)	elektron ( $\beta$ )	0,705	0,559	0,327	0,447
(1, 0, 0)	lyuk ( $\gamma$ )	0,907	0,198	1,109	0,342
(1, 1, 0)	lyuk ( $\alpha$ )	0,233	0,454	1,584	0,685

A de Haas-van Alphen-periódusok nagysága  $10^{-7}$  Gauss $^{-1}$  egységekben ha az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia a táblázatbeli  $\varepsilon$  energiaparaméter értékeivel rydbergekben egyezne meg. Az első oszlopban az alkalmazott H mágneses tér iránya, a másodikban a felület jellege található. Az  $\varepsilon = 0,33$  ry-hez tartozó értékek interpolálás útján számított értékek. Az  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  jelölések a (4.10) ábra görbéire vonatkoznak.

leti adatokból visszszámított maximális felület értékeket. Ugyanott feltüntettük a Harrison valamint az Altmann-Cracknell-modell által jelzett periódusokhoz tartozó  $A_0$  felületértékeket. A jelen számításokból adódó periódusokat tartalmazza a 4.2. táblázat, ahol az  $\alpha, \dots, \delta$  jelölések magyarázata is megtalálható. Ha  $\varepsilon_F < 0,32$  ry, akkor mi is ugyanannyi számú periódust kapnánk, mint Harrison (az ábrán csak



azokat a maximális keresztmetszeteket tüntettük fel, melyek  $\varepsilon > 3,23$  ry esetén is megmaradnak). Így a következő kettős alternatíva előtt állunk. Ha  $\varepsilon_F < 0,323$  ry, akkor kapjuk a nagyszámú, Harrison (1963) eredményeivel lényegében megegyező keresztmetszeteket, melyek közül a legszó három nagyjából megfeleltethető a három



4.11. ábra. A kalcium fém Fermi-felülete a jelen számítások alapján. Az L pontok körüli „elektron-csomagok” kinőnek első BZ-ból, ugyanakkor a W sarokpontok körüli „lyuk-csomagok” benyomódnak az első BZ-ba. E csomagok felülete a Fermi-felület

mérési eredménynek, de a többihez tartozó periódusokat a kísérletek nem mutatták. Ha feltételezzük, hogy  $\varepsilon_F > 0,32$ , akkor az  $\alpha$ -görbével értelmezni tudjuk az 1-es, a  $\beta$ -görbével közelítően a 3-as, a  $\gamma$ -val a 2-es kísérleti eredményt. Minthogy esetünkben az első alternatívához nem csak jóval több periódus tartozik a mértnél, hanem ezek hosszúsága (vagy a megfelelő keresztmetszet nagysága) lényegesen kisebbnek (a keresztmetszet nagyobbak) adódna mérési eredményeknél, ezért a második alternatívát választottuk, és feltételeztük, hogy a Fermi-energia

$$\varepsilon_F = 0,33 \text{ ry} \quad (4.2.2)$$

Ehhez az energiaparaméterhez tartozó konsztans energiájú felület a Fermi-felület, melynek perspektivikus képét mutatja a 4.11. ábra. A de Haas—van Alphen-periódusok elméletileg várható értékeit a Condon—Marcus (1964) adatokkal összehasonlító 4.3.

táblázatból látszik, hogy az egyezés a két alacsonyabb periódus esetében sokkal jobb, mint Altmann és Cracknell (1964) esetében, és bár nem olyan jók, mint Harrison (1963) modelljénél, de mi nem kaptunk annyi kísérletileg nem mutatkozó periódust, mint Harrison.

4.3. TÁBLÁZAT

H iránya	H	A—C	D	Kísérli.
(1, 1, 1) el.			0,104	
(1, 1, 0) el.	0,50		0,45	
(1, 1, 0) el.	4,3	1,2		$0,57 \pm 5 \%$
(1, 0, 0) el.	0,42			
(1, 0, 0) ly	0,30	3,8	0,34	
(1, 0, 0) ly	0,76	8,3		$0,77 \pm 5 \%$
(1, 0, 0) ly	0,085			
(1, 1, 0) ly	0,71	3,8	0,69	
				$3,05 \pm 2 \%$

A de Haas—van Alphen-periódusok mért és számított értékei  $10^{-7}$  Gauss egységeken. Az első oszlopban az alkalmazott (ott)andó mágneses tér iránya és az található, hogy a periódus az első sávban levő lyukaktól (ly), vagy a második sáv elektronjaitól (el) származik. A második oszlop Harrison (1963), a harmadik Altmann és Cracknell (1964), a negyedik a disszertáció számított eredményeit tartalmazza. Az ötödik oszlopbeli kísérleti eredményeknek a H irányához való megfeleltetése a szerzők (Condon, Marcus, 1964) szerint erősen kétséges, és a leghosszabb,  $3,05 \times 10^{-7}$  Gauss periódushoz nem is tudtak megfelelő megfeleltetést találni.



Ami az  $\varepsilon_F$  Fermi-energiának az  $\Omega$  atomi térfogattól való függését illeti, erre vonatkozóan átvesszük a szabad elektron elmélet közelítését:

$$\varepsilon_F^0 = \left( 3\pi^2 \frac{Z}{\Omega} \right)^{2/3} ry, \quad (4.2.3)$$

ahol  $Z$  az atomkénti vezetési elektronok száma. Ennek megfelelően feltételezzük:

$$\varepsilon_F = 0,33 \left( \frac{\Omega_0}{\Omega} \right)^{2/3} ry, \quad (4.2.4)$$

ahol  $\Omega_0$  az atmoszférikus nyomáshoz tartozó térfogat. A 3.4.—3.9. ábrákon e megfontolásokból eredő Fermi-energiákat tüntettük fel. Látható, hogy az eredmények összhangban vannak kisebb atomi térfogatok esetén is azzal a követelménnyel, hogy a Fermi-energiának az első és második sáv átfedésében kell lennie ( $\varepsilon_{L_2} < \varepsilon_F < \varepsilon_{w_2}$ ), sőt esetünkben a Fermi-energia mindvégig a  $K_1$  nivå fölé marad, ami azt jelenti, hogy modellünk növekvő nyomás alatt is megtartja azt a vonását, hogy a lyukak csak a  $W$  pont környezetére korlátozódnak. Ez azt jelenti, hogy a de Haas—van Alphen-periódusok számában nem, csupán nagyságukban várunk eltérést az atmoszférikus nyomáshoz viszonyított helyzethez képest.

A stroncium és a bárium Fermi-felületére vonatkozóan tudomásunk szerint még nincsenek kísérleti eredmények. Bár a sávstruktúrák sok hasonló vonást mutatnak a kalciuméhoz, mégis, mivel kvantitatíve nem végeztünk számításokat a konstans energiájú felületekre, azért most legfeljebb csak korlátokat tudunk mondani, melyek közé kell esnie az  $\varepsilon_F$  Fermi-energiának. A stroncium esetében:

$$0,23 < \varepsilon_F^{Sr} < 0,32 ry. \quad (4.2.5)$$

A bárium atmoszférikus nyomáson térben centrált rácsot alkot, erre vonatkozó eredményeink nem elegendő pontosak ahhoz, hogy e korlátokat meg tudjuk adni.

### 4.3. Ciklotron tömegek

Az elemekből jól ismert tény, hogy egy  $m$  tömegű és  $e$  töltésű részecske  $H$  mágneses térben olyan pályát ír le, melynek vetülete a  $H$ -ra merőleges síkon kör. E körmozgás  $\omega_H$  frekvenciája, az ún. ciklotron frekvencia egyszerűen

$$\omega_H = \frac{e}{mc} H, \quad (4.3.1)$$

ahol  $c$  a fénysebesség. Fémek belsejében az elektronok mozgásuk során állandó reflexiókat szenvednek a Bragg-féle síkokon, ennek következményeképpen a mozgás frekvenciája megváltozik. Könnyen kimutatható (lásd pl. Ziman, 1964, 250. oldal), hogy reális fémek esetében

$$\omega_H = \frac{2\pi e}{c\hbar^2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial A_0} H \quad (4.3.2)$$



Előző egyenletünkkel összehasonlítva a mozgást úgy tekinthetjük, mintha az elektronok  $m$  tömeg helyett az

$$m_H^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A_0}{\partial \varepsilon} \quad (4.3.3)$$

effektív, vagy ciklotron tömeggel rendelkeznének. E képletekben  $A_0$  a  $k$ -térben, a  $H$ -ra merőleges síkban leírt pályák által körülzárt felületek közül az extrémálisnak a nagysága. A  $\partial A_0 / \partial \varepsilon$  derivált az  $\varepsilon = \varepsilon_F$  Fermi-felületen veendő. A 4.2.—4.7. ábrákon bemutatott eredményekből az  $m^*$  ciklotron tömeg meghatározható. Polárplani-

méterrel kiszámítottuk a különböző  $\varepsilon$  energiaparaméterekhez tartozó  $A_0$  felületeket és a differenciálhányadost a differenciák hányadosával közelítve meghatároztuk az  $m_H^*$  ciklotron tömegeket az  $\varepsilon_F = 0,33$  ry Fermi-energiánál.

Kísérletileg ugyancsak a de Haas—van Alphen-mérések adnak felvilágosítást az  $m_H^*$  ciklotron tömegről. A mágneses szuszceptibilitás  $1/H$ -szerint periodikus változásainak amplitúdója függ a hőmérséklettől és  $\exp(-KT/\hbar\omega_H)$ -val arányos ( $K$

4.4. TÁBLÁZAT

$H$ irány	$H$	$D$	Kísérlet
(1, 1, 0) el	0,31	0,56	$0,65 \pm 15\%$
(1, 0, 0) ly	-0,30		
(1, 1, 0) ly	-0,16	-0,704	$0,62 \pm 15\%$
(1, 1, 0) ly	-0,35		
(1, 1, 1) el		$\sim 1,00$	
			$0,30 \pm 10\%$

Ciklotron tömegek a szabad elektron tömeg egységében mérve. Az első oszlop adatai jelentik a mágneses tér irányát, mint a 4.3. táblázatban.  $H$  alatt Harrison (1963),  $D$  alatt e disszertáció eredményei láthatók összehasonlítva az utolsó oszlopbeli kísérleti adatokkal (Condon, Marcus, 1964).

a Boltzmann-konstans), amiből  $\omega_H$ , s így  $m_H^*$  is mérhető. Hangsúlyoznunk kell, hogy  $m_H^*$  a  $H$  térerősség irányától függ, az erre az irányra merőleges síkkal vett maximális metszetet jelenti  $A_0$ .

A kísérleti (Condon, Marcus, 1964) és elméleti eredményeket tartalmazza a 4.4. táblázat. Az egyezés a mérési eredmények hibahatárán belül van. (N. b. Kísérletileg csak  $|m_H^*|$  van adva az előjelmegfeleltetés attól függ, hogy elektronok vagy lyukak effektív tömegeiről van szó.)

### 5. A vezetőképesség számítása

Fémek elektromos vezetőképessége meglehetősen összetett jelenség. A külső elektromos tér hatására gyorsuló elektronok a kristályrács „hibahelyeivel” való ütközések révén leadják energiájukat és ennek következtében egy a térrel ellentétes irányú átlagsebességre tesznek szert, mely végső soron a makroszkopikusan mérhető elektromos áramerősségre vezet.

A „hibahelyek” alatt általánosan minden olyan rendellenességet értünk, mely a tökéletes rácsstruktúrától való eltérést jelenti. Ezek két nagy csoportra oszthatók, a hőmérséklettől függetlenül jelen levő idegen, szennyező atomokra, rácshibákra, és az ionok hőmozgására. Ennek megfelelően az ellenállás (vagy a vezetőképesség) is két részből tevődik össze, egy ún. „ideális” ellenállásból, mely csupán az ideális tisztaságú rács hőmozgásának hatására lép fel, és amely az adott fémre jellemző módon függ a hőmérséklettől, valamint a maradék, a hőmérséklettől független, adott fémek belső is a szennyeződések koncentrációjától, a kristálystruktúra ki-



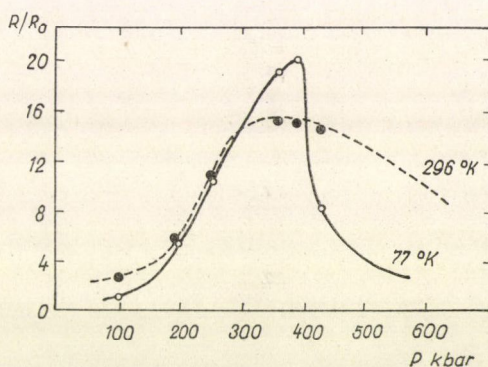
alakulásának „történetétől” (a keletkezett rácshibáktól stb.) függő részről. Mi most csak a kalcium fém ideális ellenállásával fogunk foglalkozni.

Az ideális ellenállás (továbbiakban röviden: ellenállás) hőmérsékletfüggésének elméleti értelmezése kielégítő összhangban van a tapasztalattal, legalábbis magas hőmérsékletek esetére (Jones, 1956), és azon a szemléletes tényen alapul, hogy növekvő hőmérséklettel növekszik az ionok hőmozgásának amplitúdója, így az elektronok tovahaladásával szemben mutatott „keresztmetszete” is, és ezzel a fém ellenállása is.

Fémek ellenállásának a külső hidrosztatikus nyomástól való függése sokkal bonyolultabb jelenség. Szemléletesen úgy gondolnánk, hogy a növekvő nyomás összenyomja a kristályt, ez szükségszerűen csökkenti a hőmozgás amplitúdóját, így a fémek ellenállását. Valóban, sok fém követi is ezt a szabályt, ezeket nevezhetjük normál fémeknek. Ilyenek például a réz, ezüst, arany, alumínium, indium, magnézium stb. Sok fémnél azonban e várakozástól eltérően az ellenállás nő a nyomással, egyeseknél csak egy vagy több maximum elérése után csökken. Már Lawson (1956) utalt arra, hogy a már említett okon kívül még további három játszhat szerepet az ellenállás nyomásfüggésének kialakításában, nevezetesen (1) a Fermi-energiának a megváltozása, (2) egy új, sűrűbb kristályformába való hirtelen átmenet, és (3) a vezetési elektronok átfedő sávjában vagy az atomok elektronstruktúrájában bekövetkező radikális változás. Ezek hatása szuperponálódhat a rács összenyomódásából származó hatásra és teljesen megváltoztathatja az ellenállás csökkenő tendenciáját növekvő nyomással.

A kalcium nem tartozik a fenti értelemben vett normál fémek közé. Ellenállása a kísérleti adatok szerint (Bridgman 1952, Balchan és Drickamer 1961, Stager és Drickamer 1963; ugyanezek idézve, valamint adatok más fémekre is a következő két összefoglaló cikkben: Bundy és Strong 1962, Drickamer 1965) nem túl gyorsan, de folytonosan emelkedik kb. 140 kbar nyomásig (1 bar = 0,98692 atmoszféra). E nyomástól kezdve az ellenállás növekedése lényegesen gyorsabbá válik, és kb. 370 kbar-nál maximumot ér el, mely közel 60-szorosa (!) az atmoszférikus nyomásnak. A maximum után az ellenállás csökkenése előbb gyorsabb, majd átmeny egy lassúbb egyenletes csökkenésbe kb. 500–600 kbar-nál, ameddig a legújabb mérések kiterjedtek (lásd 5.1. ábrát).

A kalcium ellenállásának ez a meglepő viselkedése mindmáig magyarázatlan volt. Mint említettük, számításainkat éppen azért végeztük el különböző atomi térfogatokra is, hogy megkíséréljük e jelenség magyarázatát adni. Az eredmények biztatóak, mert az első és második vezetési sáv átfedése, melynek mértéke az  $\varepsilon_{w_2} - \varepsilon_{L_2}$  energiakülönbség, és amely felelős a kalcium fémes tulajdonságaiért, csökkenő atomi térfogattal, tehát növekvő nyomással maga is csökken. E kvalitatív eredményt kíséréljük meg jelen fejezetben kvantitatíve is megfogalmazni.



5.1. ábra. A kalcium atmoszférikus nyomáshoz viszonyított ellenállásának ( $R/R_0$ ) függése a nyomástól ( $P$ ) Stager és Drickamer után (1963)



### 5.1. A vezetőképesség tenzora, egyszerű modell a Fermi-felületre

A Boltzmann-egyenlet megoldásából (pl. Ziman 1964, 182. oldal, 7.20. képlet) a fémek elektromos vezetőképességére a következő tenzor adódik:

$$\sigma = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int_0^\infty \tau v_k v_k \frac{\partial f_k^0}{\partial \varepsilon} dS \frac{d\varepsilon}{|\nabla_k \varepsilon(k)|} \quad (5.1.1)$$

Itt  $f_k^0$  az elektrongáz egyensúlyi energiaeloszlásgörbéje, fémelektronok esetén a Fermi–Dirac-eloszlásfüggvény,  $v_k$  a  $k$  állapotú elektronok sebessége:

$$v_k = \nabla_k \varepsilon(k)/\hbar \quad (5.1.2)$$

$\tau$  a relaxációs idő, melyet az elektron-fonon kölcsönhatás határoz meg és melyről később lesz még szó.  $S$  a  $k$  térben az  $\varepsilon = \text{konst.}$  energiájú felület, ezen veendő az  $S$ -szerinti belső integrál. Látható, hogy ha a relaxációs időt ismerjük, elvileg minden eszköz rendelkezésünkre áll a  $\sigma$ -tenzor kiszámítására. A (3.1.6)–(3.1.7) egyenletekből az  $\varepsilon(k)$  energiaspektrum kiszámítható, ebből, mint láttuk a konstans energiájú felület, és ezek mentén a  $v_k$  sebességek, azaz az  $\varepsilon(k)$  függvény  $k$ -szerinti gradiensei is meghatározhatók. Ez az út azonban reménytelenül hosszadalmasnak látszik, ezért kénytelenek leszünk megelégedni viszonylag nagy pontosságú eredményeinkre egyszerűbb modelleket építeni, melyek bár kevésbé pontosak, számításainkat mégis el tudjuk rajtuk végezni. A  $\tau$  relaxációs idő kiszámításával később foglalkozunk. Most csak annyit használunk fel későbbi eredményeinkből, hogy a  $\tau$  relaxációs idő csupán az energia függvénye,  $\tau = \tau(\varepsilon)$ . A relaxációs idő bevezetésének jogosságát, valamint a Boltzmann-egyenlet általánosabb megoldásait tárgyalja Fogarassy (1965). Jelen fejezetben az  $\varepsilon(k)$  energiaspektrumot és a konstans energiájú felületeket szeretnénk modellizálni.

Első próbálkozás gyanánt megkísérelhetnénk ugyanazt az eljárást, amit Harrison (1960) tett az alumínium esetén és amiről már részletesen beszámoltunk az 1.6. fejezetben. Igaz, hogy az általunk használt LMP erősen nem lokális, mégis megkísérelhetnénk egy hipotetikus  $\bar{V}$  potenciál  $\bar{V}_{111}$ ,  $\bar{V}_{200}$  Fourier-koefficienseit úgy megválasztani, hogy az (1.6.8)–(1.6.11) képletek segítségével visszkapjuk a már említett  $\varepsilon$  energiaértékeket a kalcium BZ-jának szimmetriapontjaiban, és akkor az (3.1.6)–(3.1.7) egyenleteknél lényegesen egyszerűbb (1.6.16)–(1.6.17) egyenletekből nyerni az  $\varepsilon(k)$  energiaspektrumot és az összes többi, a  $\sigma$ -tenzor kiszámításához szükséges további mennyiséget. Egyszerű próba meggyőző azonban bennünket ennek az útnak járhatatlanságáról. Az 5.1. táblázatban bemutatott eredményekből látszik, hogy a kalcium  $\varepsilon(k)$  energiaspektruma nem számítható

valamilyen lokális  $\bar{V}$  potenciál két Fourier-koefficiensével és az energiaskálát rögzítő  $\alpha$  paraméterrel: a két meghatározott  $\varepsilon$  energiaértékekből visszaszámított  $\alpha$ ,  $\bar{V}_{111}$ ,  $\bar{V}_{200}$  paraméterek nem csak nagyságra, de néha még előjelre is különböznek egymástól attól függően, melyik szimmetriapontban vesszük értékü-

5.1. TÁBLÁZAT

	$W$	$L$	$K$	$X$
$\alpha$	0,9506	0,9539	0,9187	0,9185
$\bar{V}_{111}$	0,0475	0,0061	−0,0208	
$\bar{V}_{200}$	0,0208		−0,0230	−0,0435

Az energia résekből visszaszámolt egyszerű pseudopotenciál paraméterek a BZ szimmetriapontjaiban. Az  $\alpha$  értékét reciprok elektromögben, a  $\bar{V}_{111}$ ,  $\bar{V}_{200}$  paramétereket rydbergekben adtuk meg.



ket. Ez egyébként nyilván ismét annak a ténynek a megnyilvánulása, hogy a kalcium esetében az  $s, p$  és  $d$  sávok egy erős hibridizációjával állunk szemben. Így más egyszerű modell után kell néznünk.

Tekintsük az elektronok és lyukak esetét külön. Az elektronokhoz tartozó konstans energiájú felületeket tekintve (4.2., 4.3., 4.11. ábrák), szembetűnő ezek hasonlósága egy gömbsüveghez, mely az  $L$  pont körül a hexagonális síkra van ráültetve. Ez egyben azt jelenti, hogy ezek az  $\varepsilon \sim k^2$  arányosságnak megfelelően közel szabad elektronoknak tekinthetők, más szóval az  $L$  pontban érvényes (1.6.9) egyenletek kiterjeszthetők a hexagonális sík fölé is a második sávba került elektronokra is. Az  $\alpha$  paraméter, mely az  $L$  pontbeli effektív tömeg inverzével arányos, nyilván az

$$\alpha = \frac{\varepsilon_{L_2} + \varepsilon_{L_1}}{2k_L^2} \left( \equiv \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \quad (5.1.3)$$

összefüggésből számítható ki. Most a  $V_{III}$  paraméter helyett azonban két, további paraméterrel, a gömbsüveg  $h$  magasságával és alapkörének  $a$  sugarával akarjuk a konstans energiájú felületeket jellemezni (lásd 5.2. ábrát). Minthogy az  $\varepsilon(k)$  görbét a  $\Gamma L$  és  $LW$  valamint az  $LK$  egyenesek mentén viszonylag nagy pontossággal ismerjük (lásd 3.6.a—3.6.b táblázatokat) ezekből egyszerű interpolációval meghatározható az a pont, amelynél az energia a  $\Gamma L$  egyenes mentén éppen a Fermi-energia,  $\varepsilon_F = 0,33$  ry lesz, ez adja a  $h$  magasságot, majd ugyanúgy a  $WL$  egyenes mentén az, amelyik az  $a$  sugarat jelenti. Ezeket az interpolációkat elvégezve a különböző  $\Omega$  atomi térfogathoz tartozó adatokkal, valamint a Fermi-energia (4.2.4)-ből számított értékeire kaptuk az  $\alpha, h, a$  paraméternek  $\Omega$ -tól függő értékeit.

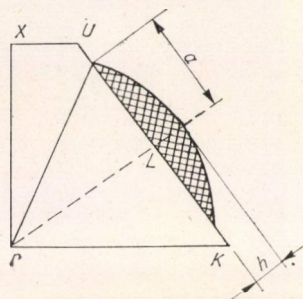
A lyukak esetében a helyzet jóval bonyolultabb. A Fermi-felület egyáltalán nem gömbszerű a  $W$  pontok körül (lásd 4.4.—4.7. és 4.11. ábrákat). Többféle formulával való kísérletezés után úgy találtuk, hogy a könnyen kezelhetőség és a számított értékek pontossága közötti optimális kompromisszumot akkor kapjuk, ha feltételezzük, hogy az  $\varepsilon(k)$  energiaspektrum elliptikus a  $W$  pont körül, azaz a lyukakhoz tartozó Fermi-felület ellipszoid:

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_{w_2} = \alpha_1(\delta k_1)^2 + \alpha_2(\delta k_2)^2 + \alpha_3(\delta k_3)^2. \quad (5.1.4)$$

Itt az  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  paraméterek ismét az effektív tömegtenzor  $x, y$  és  $z$  irányú komponenseivel fordítva arányosak, azaz

$$\alpha_i = \frac{\hbar^2}{2m_i^*} \quad (5.1.5)$$

a  $\delta k_i$  komponensek pedig a  $W$  ponttól mért vektor komponensei ( $k_i = k_w + \delta k$ , ahol  $k_w$  a  $W$ -be mutató  $k$ -vektor). Sajnos az  $\alpha_i$  paraméterek numerikus értékeinek megbecsülése eléggé határozatlan, mivel e paraméterek, azaz az effektív tömegek erősen  $k$ -függőek. A 3.4. ábrából látható, hogy az  $\varepsilon(k)$  görbének inflexiók pontja van a  $\Gamma W$  egyenes mentén, nem messze a  $W$  ponttól. Az effektív tömeg, mely éppen az  $\varepsilon(k)$  függvény második deriváltjával fordítva arányos, itt előjelet vált, más szóval



5.2. ábra. Az elektron-felületek jellemzése a gömbsüveg  $h$  magasságával és  $a$  sugarával



a korábbi pozitív effektív tömegű elektronokból a negatív effektív tömegű lyukak lesznek annak megfelelően, hogy a  $W$  pont körül már csak lyukakat találhatunk. Másrészt viszont az is igaz, hogy az effektív tömegek értékeire a Fermi-felület mentén azaz csak a  $W$  ponthoz közeli tartományban lesz szükségünk, mivel a lyukak „barlangjai” nem nyúlnak messze a  $W$  ponttól, legalább is a  $\Gamma W$  irány mentén.

5.2. TÁBLÁZAT

$\Omega/\Omega_0$	1	0,8	0,6
$\alpha$	0,9206	0,9041	0,8877
$h$	0,0838	0,0715	0,0275
$a$	0,2889	0,2792	0,2697
$\varepsilon_{W_2}$	0,3552	0,3781	0,4046
$\alpha_1$	-4,5050	-3,7135	-0,9017
$\alpha_2$	-2,7920	-2,8397	-3,0658
$U_{e1}$	0,197	0,341	0,483
$U_{lyuk}$	0,100	0,128	0,137

A kalcium Fermi felületét közelítően leíró paraméterek az  $\Omega/\Omega_0$  relatív atomi térfogat függvényében,  $\alpha$  jelenti az elektronok,  $\alpha_1, \alpha_2$  a lyukak inverz effektív tömegeit a szabad elektron tömeg-egységre vonatkoztatva,  $h$  és  $a$  az elektron „csomag” méreteit atomi egységekben,  $\varepsilon_{W_2}$  a  $W$  pontbeli legalacsonyabb energia-értéket rydbergekben,  $U_{e1}, U_{lyuk}$  pedig a deformációs potenciál elektronokra, ill. lyukakra vonatkozó arányossági tényezőjét rydbergekben.

esetén kapjuk az  $\alpha_1, \alpha_2$  paraméterek értékeit. Így a Fermi-felületet az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia mellett az elektronok esetében az  $\alpha, h, a$  a lyukak esetében az  $\varepsilon_{W_2}, \alpha_1, \alpha_2$  paraméterekkel fogjuk jellemezni, melyeknek a pontos sávstruktúrából becsült numerikus értékeit tartalmazza az 5.2. táblázat.

Visszatérve a  $\sigma$  vezetőképességi tenzor (5.1.1) alakjára, lényegében Abeles és Meiboom (1954) gondolatmenetét követve írjuk azt a következő alakba:

$$\sigma_{ij} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int_0^\infty \left[ \tau(\varepsilon) \frac{\partial f_k^0}{\partial \varepsilon} \int_s v_i v_j \frac{dS}{|\nabla_k \varepsilon(k)|} \right] d\varepsilon = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int_0^\infty \tau(\varepsilon) \frac{\partial f_k^0}{\partial \varepsilon} D_{ij}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (5.1.6)$$

ahol a

$$D_{ij}(\varepsilon) = \int_s v_i v_j \frac{dS}{|\nabla_k \varepsilon(k)|} \quad (5.1.7)$$

integrál értéke az  $\varepsilon$  energiaparaméterhez tartozó  $S$  konstans energiájú felületen veendő. Az  $f_k^0$  egyensúlyi eloszlásfüggvényről feltételezzük, hogy az jól közelíthető a  $T=0$  hőmérsékletre tartozó Fermi—Dirac-féle eloszlásfüggvénnyel, azaz az elektrongázt teljesen elfajultnak tételezzük fel. Ebben az esetben a  $-\partial f_k^0/\partial \varepsilon$  derivált a Dirac-féle  $\delta$ -függvénnyel közelíthető, így

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{4\pi^3} \tau(\varepsilon_F) D_{ij}(\varepsilon_F) \quad (5.1.8)$$

A Fermi-felületen vett  $D_{ij}(\varepsilon_F)$  integrálokat külön számoljuk ki az elektronok és lyukak esetében.

Szimmetriaokok miatt köbös kristályban az  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  paraméterek közül kettő, mondjuk az  $\alpha_1$  és  $\alpha_3$  meg kell, hogy egyezzen (lásd pl. 4.5. ábrát), s így az  $\alpha_1, \alpha_2$  paraméterek a táblázatosan adott  $\varepsilon(k)$  függvények másodrendű differenciáiból közvetlen a  $W$  pont szomszédságában két irányban, mondjuk a  $WX$  és  $WL$  irányokban levő első osztáspontban numerikusan meghatározhatók. Elvégezve ezt, ismét csökkenő  $\Omega$  értékekre ugyanúgy, mint az  $L$  körüli lyukak



Az elektronok esete az egyszerűbb. Ekkor az energia hullámszámvektor összefüggés egyszerűen (lásd 5.1.3)

$$\varepsilon(k) = \alpha k^2, \quad \alpha = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{el}}^*}. \quad (5.1.9)$$

Így a  $D_{ij}$  tenzor skalárra redukálódik:

$$D_{ij} = 0 \quad \text{ha} \quad i \neq j$$

$$D = D_{ii} = \int_s v_i^2 \frac{dS}{\hbar v} = \frac{1}{3\hbar} \int_s v dS. \quad (5.1.10)$$

Felhasználva (5.1.2)-t és (5.1.9)-et

$$v = \frac{1}{\hbar} 2\alpha k = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\alpha \varepsilon} = \sqrt{\frac{2}{m_{\text{el}}^*} \varepsilon}, \quad (5.1.11)$$

azaz a  $v$  sebesség az  $S$  konstans energiájú felületen állandó, így

$$D(\varepsilon_F) = \frac{1}{3\hbar} \sqrt{\frac{2}{m_{\text{el}}^*}} \sqrt{\varepsilon_F} \int_{F_s} dS. \quad (5.1.12)$$

Behelyettesítve ezt (5.1.8)-ba az elektronoktól származó teljes  $\sigma$  vezetőképesség

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{e^2}{12\pi^3 \hbar} \sqrt{\frac{2}{m_{\text{el}}^*}} \tau(\varepsilon_F) \sqrt{\varepsilon_F} \int_{F_s} dS, \quad (5.1.13)$$

ahol az  $F_s$  a Fermi-felületet, az integrál ennek felszínét jelenti. Minthogy elektronok esetében a Fermi-felület 8 egybevágó, egyenként  $\pi(a^2 + \hbar^2)$  felületű gömbsüvegből áll, azért

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{2e^2}{3\pi^2 \hbar} \sqrt{\frac{2}{m_{\text{el}}^*}} \tau(\varepsilon_F) \sqrt{\varepsilon_F} (a^2 + \hbar^2). \quad (5.1.14)$$

A lyukak esetében a Fermi-felület a  $W$  pont körüli

$$\alpha_1 x_1^2 + \alpha_2 x_2^2 + \alpha_3 x_3^2 = c^2 \equiv (\varepsilon_F - \varepsilon_{w_2}) \quad (5.1.15)$$

egyenletű ellipszoidokból áll. A köbös szimmetria miatt, mint már láttuk  $\alpha_1 = \alpha_3$  és a most bevezetett  $x_i$  koordináták nyilván az (5.1.4)-beli  $\delta k_1, \delta k_2, \delta k_3$  komponenseket helyettesítik, ahol  $k = k_w + \delta k$ . Emiatt

$$v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_i} \varepsilon(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon(k) = \frac{2}{\hbar} \alpha_i x_i, \quad (5.1.16)$$

így most

$$D_{11} = \frac{2}{\hbar^2} \int_s \frac{(\alpha_1 x_1)^2}{\{(\alpha_1 x_1)^2 + (\alpha_2 x_2)^2 + (\alpha_3 x_3)^2\}^{1/2}} dS \quad (5.1.17)$$

és az  $S$  felületet az (5.1.15) egyenlet definiálja. Az integrál kiszámítás végett vezessük be először a

$$\xi_i = \sqrt{\alpha_i} x_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.1.18)$$



új változókat. E koordinátákban az (5.1.15) ellipszisek egyenlete

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 = c^2 \quad (5.1.19)$$

Ez sugallja, hogy célszerű lesz a  $\xi$ -térbeli polárkoordinátákkal az  $S$  felületen felületi koordináta-rendszert bevezetni

$$\begin{aligned} \xi_3 &= c \sin \vartheta \cos \varphi \\ \xi_1 &= c \sin \vartheta \sin \varphi \\ \xi_2 &= c \cos \vartheta \end{aligned} \quad (5.1.20)$$

A  $dS$  felületelem a  $\vartheta, \varphi$  koordinátákkal kifejezve,

$$dS = h_1 h_2 d\vartheta d\varphi, \quad (5.1.21)$$

ahol (pl. Chisholm—Morris, 1964, II. kötet, 14., 36 és 14.12 képletek)

$$\begin{aligned} h_1 &= \left[ \left( \frac{\partial x_1}{\partial \vartheta} \right)^2 + \left( \frac{\partial x_2}{\partial \vartheta} \right)^2 + \left( \frac{\partial x_3}{\partial \vartheta} \right)^2 \right]^{1/2} = c \left[ \frac{1}{\alpha_1} \cos^2 \vartheta + \frac{1}{\alpha_2} \sin^2 \vartheta \right]^{1/2} \\ h_2 &= \left[ \left( \frac{\partial x_1}{\partial \varphi} \right)^2 + \left( \frac{\partial x_2}{\partial \varphi} \right)^2 + \left( \frac{\partial x_3}{\partial \varphi} \right)^2 \right]^{1/2} = \frac{c}{\sqrt{\alpha_1}} \sin \vartheta \end{aligned} \quad (5.1.22)$$

Ezzel

$$dS = \frac{c^2}{\alpha_1 \sqrt{\alpha_3}} \sin \vartheta [\alpha_3 \cos^2 \vartheta + \alpha_1 \sin^2 \vartheta]^{1/2} d\vartheta d\varphi \quad (5.1.23)$$

Az  $D_{11}$  integranduszát is kifejezve a  $\vartheta, \varphi$  koordinátákkal, a  $\vartheta, \varphi$  szerinti integrálok elemi úton elvégezhetők, az eredmények

$$\begin{aligned} D_{ij} &= 0, \quad \text{ha } i \neq j \\ D_{11} &= D_{33} = \frac{8c^3 \pi}{3 \sqrt{\alpha_3} \hbar^2}, \quad D_{22} = D_{11} \frac{\alpha_3}{\alpha_1}. \end{aligned} \quad (5.1.24)$$

Kifejezve az  $\alpha_i$  paramétereket az  $m_i^*$  effektív tömegekkel (5.1.5 képlet) behelyettesítve a  $D$ -k kifejezését a (5.1.6)-ba, kapjuk az egy ellipszoidhoz tartozó vezetőképességeket:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= 0, \quad \text{ha } i \neq j \\ \sigma_{11} &= \frac{2^{3/2} e^2 \sqrt{m_2^*}}{3 \pi^2 \hbar^3} (\varepsilon_F - \varepsilon_{w_2})^{3/2} \tau(\varepsilon_F), \\ \sigma_{33} &= \sigma_{11}, \quad \sigma_{22} = \sigma_{11} \frac{m_1^*}{m_2^*} \end{aligned} \quad (5.1.25)$$

Az egy ellipszoidhoz tartozó átlagos vezetőképesség a  $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$  komponensek egyszerű számtani közepe. Egy ellipszoidnak azonban nyilván csak egynegyede



tartozik az első BZ-beli Fermi-felülethez, viszont összesen 24  $W$  pont található, így a lyukaktól származó eredő vezetőképesség

$$\begin{aligned}\sigma_h &= 24 \frac{1}{4} \frac{1}{3} (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) = 2\sigma_{11} \left( 2 + \frac{m_1^*}{m_2^*} \right) = \\ &= \frac{2^{5/2} e^2 \sqrt{m_2^*}}{3\pi^2 \hbar^3} \left( 2 + \frac{m_1^*}{m_2^*} \right) (\varepsilon_F - \varepsilon_{w_2})^{3/2} \tau(\varepsilon_F)\end{aligned}\quad (5.1.26)$$

Látható, hogy a vezetőképességek kiszámítására a következő lépésben a  $\tau(\varepsilon_F)$  relaxációs időt kell meghatároznunk.

## 5.2. A $\tau$ relaxációs idő

A  $\tau$  relaxációs időt közvetlenül az elektronfonon kölcsönhatás határozza meg. A Boltzmann-egyenlet szokásos közelítő megoldásánál kapjuk (lásd pl. Jones 1956, 240. oldal).

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{m^* k N \Omega}{2\pi \hbar^3} \int_0^\pi |u_{k'k}|^2 (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (5.2.1)$$

ahol  $N$  a kristály atomjainak száma,  $k = |k|$  és  $\theta$  a  $k$  és  $k'$  hullámszámvektorok által bezárt szög,  $m^*$  a töltéshordozók effektív tömege. Az

$$U_{kk'} = \int \psi_k^*(r) U_p(r) \psi_{k'}(r) d^3r \quad (5.2.2)$$

mátrixelem tartalmazza az  $U_p(r)$  perturbációs potenciált, mely elvileg minden, a tökéletes kristály  $U(r)$  potenciáljától való eltérést magában foglal. Mi most ezen eltérések közül csak a hőmozgás okozta hatásokat akarjuk figyelembe venni. Céljainkra különösen alkalmas a Bardeen és Shockley (1950) által bevezetett ún. deformációs potenciál, mert olyan paramétereket tartalmaz, amelyek energiasáv számításainkból közvetlenül meghatározhatók. E módszernél a rács rezgéseinek hatását úgy tekintjük, hogy e rezgések a kristályban lokális,  $\varepsilon_{ij}(r)$  feszültségeket keltenek, melynek következtében a kristály lokálisan összenyomódik, ill. kitágul, megváltozik az elektrongáz sűrűsége, ami maga után vonná az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia lokális megváltozását is. Minthogy azonban ennek állandónak kell maradnia azért a hiány pótlására elektronok vándorolnak be, ill. a fölös elektronok távoznak el a kiszemelt környezetből. Ez azonban elektromos erők felléptéhez vezet, melynek potenciálját azonosítjuk az  $U_p$  perturbációs potenciállal. Minthogy a lokális deformációk okozta potenciálok feltehetően gyengék a periodikus potenciálhoz képest, azért első közelítésben az  $U_p$  potenciál és az  $\varepsilon_{ij}$  feszültségi komponensek közötti kapcsolatot lineárisnak tételezhetjük fel. Kőbös kristályban szimmetriaokok miatt csak az  $\varepsilon_{ii}$  komponensek maradnak meg azonos arányossági tényezőkkel, így végül is írhatjuk:

$$U_p(r) = U \Delta(r), \quad (5.2.3)$$

ahol  $\Delta$  a dilatáció:

$$\Delta = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}, \quad (5.2.4)$$



azaz a relatív térfogatváltozás. Az  $U$  arányossági tényező értéke különböző lehet elektronokra és lyukakra, ezért az  $U_{el}$  és  $U_h$  konstansokat fogjuk használni attól függően, hogy elektronokról vagy lyukakról van-e szó. Értékeiket meghatározhatjuk úgy, hogy a fémeket *egyenletes* nyomásnak vetjük alá, és meghatározzuk a legalacsonyabb elektron, ill. a legmagasabb lyuk energianívók eltolódását:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{el}(\Delta) &= \varepsilon_{el}(0) + U_{el} \cdot \Delta \\ \varepsilon_h(\Delta) &= \varepsilon_h(0) + U_h \cdot \Delta,\end{aligned}\quad (5.2.5)$$

ahol  $\varepsilon_{el}(0)$ , ill.  $\varepsilon_h(0)$  a megfelelő elektron, ill. lyuk (hole) energiák az atmoszférikus nyomáson. A mi számításainkban elektron-energiák gyanánt az  $\varepsilon_{L1}$ , a lyuk energiák gyanánt az  $\varepsilon_{w_2}$  nívó veendő, és mivel ezeknek a  $\Delta$  dilatációtól, azaz a relatív térfogatváltozástól való függését kiszámítottuk (3.11. és 3.12. ábrák, 3.8. táblázat), azért az  $U_{el}$ ,  $U_h$  arányossági tényezők megbecslése elemi numerikus feladat, értékeiket az 5.2. táblázatban adtuk meg.

A lokális, a hőmozgás hatására keletkező dilatációk meghatározhatók az ionok kitéréseiből:

$$R = R_n + R(R_n), \quad (5.2.6)$$

ahol

$$R(R_n) = N^{-1/2} \sum_q e_q (a_q e^{iqR_n} + a_q^* e^{-iqR_n}). \quad (5.2.7)$$

Itt  $a_q$  a  $q$ -dik módus amplitúdója  $e_q$  pedig a polarizációs egységvektor. Ezzel a keregett lokális dilatáció

$$\Delta(r) = \text{div } \delta R(r) = iN^{-1/2} \sum_q (qe_q) [a_q e^{iqR_n} - a_q^* e^{-iqR_n}]. \quad (5.2.8)$$

Így az  $U_p$  perturbációs potenciál ismeretessé vált. Mátrixelemei az  $U_{el}$ ,  $U_h$  paraméterek függvényében meghatározhatók. Behelyettesítve ezeket a  $\tau$  relaxációs idő (5.2.1) képletébe, Bardeen és Shockley (1950) azt nyerték, hogy

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* k u^2 K T}{\pi \hbar^3 c_{ii}}, \quad (5.2.9)$$

ahol  $K$  a Boltzmann-állandó,  $T$  az abszolút hőmérséklet, és  $c_{ii}$  a rugalmassági tenzor (bármelyik első három) diagonális eleme. Látható, hogy  $\tau$  a  $k$  hullámszámvektor abszolút értékétől függ. Elektronjaink esetében a Fermi-felület gömb, így

$$k = \frac{\sqrt{2m_{el}^*}}{\hbar} \varepsilon^{1/2}, \quad (5.2.10)$$

tehát

$$\frac{1}{\tau_{el}} = \frac{(2m_{el}^*)^{3/2} U_{el}^* K T}{2\pi \hbar^4 c_{ii}} \varepsilon^{1/2}. \quad (5.2.11)$$

E formula elliptikus energiafelületekre is általánosítható (Blatt 1957, 334. oldal), a változás mindössze annyi, hogy  $m_{el}^*$  helyébe  $m_h^* = (m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/3}$  és természetesen  $U_{el}$  helyébe  $U_h$  írandó.



Látható, hogy az előző fejezetben felhasznált azon feltevésünk, hogy a  $\tau$  relaxációs idő csak az  $\varepsilon$  energiától függ, teljesül, így a  $\sigma$  vezetőképességre nyert korábbi eredményeinkbe  $\tau$  mostani kifejezése egyszerűen behelyettesíthető.

A  $c_{ii}$  rugalmassági együtthatót a kísérleti adatokból vesszük. Ezek sajnos elég hiányosak, közvetlenül a  $c_{ij}$  komponenseket nem sikerült megtalálnunk. Így legalább két független rugalmassági adatot kell ismernünk, amelyekből a  $\lambda$ ,  $\mu$  Lamé-féle állandókat, majd ezekből a  $c_{ii}$  együtthatót meghatározhatjuk.

A kalcium  $\beta$  kompresszibilitására (Kittel 1966, 115. oldal)

$$\beta = 57 \cdot 10^{-7} \frac{\text{cm}^2}{\text{kg}}, \quad (5.2.12)$$

a Young modulusára (Smithells 1955, 571 oldal) az

$$E = 3,0 \frac{\text{lb}}{\text{in}^2} \cdot 10^6 = 0,21 \cdot 10^6 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2}$$

értékeket találtuk. Érvényes

$$E = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\lambda + \mu}$$

$$\frac{1}{\beta} = \frac{3\lambda + 2\mu}{3}$$

$$c_{ii} = c_{11} = \lambda + 2\mu. \quad (5.2.13)$$

Ezekből egyszerű számolással adódik

$$c_{ii} = 0,283 \cdot 10^6 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2}. \quad (5.2.14)$$

Sajnos, a paraméterek nyomásfüggésére (a  $\beta$ -t kivéve) nem ismerünk adatokat, így a  $c_{ii}$  állandót a nyomástól független adatnak tekintettük további számításainkban.

### 5.3. A vezetőképesség a csökkenő térfogat függvényében, összehasonlítás a mérési eredményekkel

Behelyettesítve a relaxációs időre nyert (5.2.11) eredményünket az elektronoktól származó vezetőképesség (5.1.14), majd az említett módosítások után a lyukaktól származó vezetőképesség (5.1.25) képletébe, nyerjük

$$\sigma_{el} = \frac{e^2 \hbar^3}{12\pi^3} \frac{c_{11}}{kT} \frac{1}{U_{el}^*} \frac{1}{(m_{el}^*)^2} 8\pi (a_2 + h^2) \quad (5.3.1)$$

$$\sigma_h = \frac{4e^2 \hbar}{3\pi} \frac{c_{11}}{kT} \frac{1}{U_h^2} \left( \frac{2}{m_1^*} + \frac{1}{m_2^*} \right) \sqrt{\frac{(\varepsilon_F - \varepsilon_{w_2})^3}{\varepsilon_F}} \quad (5.3.2)$$



Ha  $T = 300^\circ\text{K}$ -re kiszámítjuk e képletek nyomástól (relatív térfogattól) független faktorait, akkor gyakorlati egységekbe átvérve

$$\sigma_{el} = 3,864 \frac{1}{U_{el}^2} \frac{1}{(m_{el}^*)^2} (a^2 + h^2) \cdot 10^4 \text{ ohm}^{-1} \text{ cm}^{-1} \quad (5.3.3)$$

$$\sigma_h = 3,864 \frac{1}{U_h^2} \left( \frac{2}{m_1^*} + \frac{1}{m_2^*} \right) \sqrt{\frac{(\varepsilon_F - \varepsilon_{w_2})^3}{\varepsilon_F}} \cdot 10^4 \text{ ohm}^{-1} \text{ cm}^{-1}. \quad (5.3.4)$$

E képletekben  $U_{el}$ ,  $U_h$ ,  $\varepsilon_F$ ,  $\varepsilon_{w_2}$  rydbergekben,  $m_1^*$ ,  $m_2^*$ ,  $m_{el}^*$   $a$ ,  $h$  atomi egységekben veendő, ahogy az 5.2. táblázatban vannak megadva. A teljes vezetőképesség és a fajlagos ellenállás nyilvánvalóan

5.3. TÁBLÁZAT

$\Omega/\Omega_0$	1	0,8	0,6
$\sigma_{el}$	0,076	0,023	0,010
$\sigma_{lyuk}$	0,317	0,138	0,025
$\sigma$	0,393	0,161	0,035
$p$	2,54	6,23	28,16
$p/p_0$	1	2,45	11,1

A kalcium fém vezetőképessége és ellenállása  $\sigma_{el}$ ,  $\sigma_{lyuk}$ ,  $\sigma$  jelentik az elektronoktól és a lyukaktól származó, valamint a teljes vezetőképességet  $10^8 \text{ ohm}^{-1} \text{ cm}^{-1}$  egységekben,  $p$  a teljes fajlagos ellenállást  $10^{-6} \text{ ohm cm}$  egységekben  $p/p_0$  pedig az atmoszférikus nyomáshoz viszonyított fajlagos ellenállást. Valamennyi adat csak a tiszta – nem szennyeződésektől és rácshibáktól származó – vezetőképességre, ill. ellenállásra vonatkozik.

$$\sigma = \sigma_{el} + \sigma_h = 1/\varrho. \quad (5.3.5)$$

A számítások eredményét tartalmazza az 5.3. táblázat.

Az atmoszférikus nyomáshoz tartozó fajlagos ellenállás kísérleti értéke  $T = 300^\circ\text{K}$ -re számítva Frank és Jeppesen (1950) mérései szerint (idézve: Gerritsen 1956, 156 oldal)

$$\varrho_{exp} = 4,0 \cdot 10^{-6} \text{ ohm cm}.$$

(5.3.6)

A számított érték az 5.3. táblázatból

$$\varrho_{sz} = 2 \cdot 5 \cdot 10^{-6} \text{ ohm cm}. \quad (5.3.7)$$

Figyelembe véve a számításokhoz használt viszonylag egyszerű modellt, valamint az „ideális”, csupán a rácsrezgésekből származó fajlagos ellenállás mérésében is fennálló bizonytalanságokat, eredményeink egyezése a tapasztalattal nem mondható rossznak.

Magasabb nyomások esetén a tapasztalattal való összehasonlítás csak kvalitatív lehet. Ennek oka az, hogy a kísérletek során nem a fajlagos ellenállást mérték, hanem csupán az atmoszférikus nyomáshoz viszonyított relatív ellenállásnövekedést (lásd pl. Bundy és Strong 1962, 101 oldal), és ezek az eredmények is csupán egy-egy ábrával vannak szemléltetve. A különböző mérési eredmények sem tökéletesen egyeznek egymással. Egyébként a fajlagos ellenállás  $\alpha_{e,p}$  nyomáskoefficiense és az ellenállás  $\alpha_{R,p}$  nyomáskoefficiense között egyszerű köbös kristályok esetén érvényes (Jones 1956, 191–192. oldal)

$$\alpha_{e,p} \equiv -\frac{1}{\varrho} \frac{\partial \varrho}{\partial p} = -\frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial p} - \frac{1}{3} \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \equiv \alpha_{R,p} + \frac{1}{3} \beta, \quad (5.3.8)$$

ahol  $\beta$  a térfogati kompresszibilitás.  $\beta$  értéke azonban kísérletileg csak 100 kbar nyomásig ismert (Bridgman 1942, Bundy és Strong 1962, 114 oldal), míg a nyomás-ellenállás összefüggéseket kb. 5–600 kbar-ig kellene megmagyarázni. Elméleti



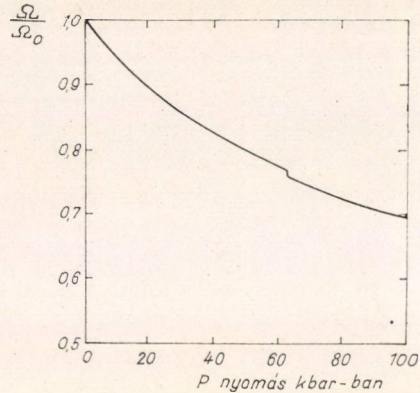
becslés ugyancsak nem ismeretes még a  $\beta$  kompresszibilitás értékeire magas nyomáson. Ehhez a kötési energiát kellene ismerni mint az  $\Omega$  atomi térfogat függvényét. A sávszerkezetre nyert,  $\Omega$ -tól függő eredmények ismeretében a kötési energia kiszámítható, de ez már kívül esik jelen disszertáció tárgyán. Így  $\beta\Omega$ -függésének hiánya is akadályát képezi a számított  $q$  fajlagos ellenállás és a mért  $R$  ellenállások összehasonlításának.

További problémát jelent az, hogy a kalcium esetén kb. 63 kbar nyomásnál térfogati diszkontinuitás lép fel (lásd 5.3. ábrát), ami a kristálystruktúra átalakulására utal. Az új struktúra mint már a 3.5. fejezet végén megjegyeztük, valószínűen térben centrált köbös rács, bár ez kisebb sűrűségű, mint a legsűrűbb felépítésű lapon centrált köbös rács. Mindenesetre az is tény, hogy a 63 kbar nyomásnál mért térfogati diszkontinuitás egyáltalán nem jelentkezik az ellenállás—nyomás összefüggésben. Valószínű, hogy magasabb nyomáson ismét fellép egy fázisátalakulás (Drickamer 1965, 99. oldal), esetleg vissza a lapon centrált rácsra, ennek azonban ismét nem látszik hatása az ellenállásváltozásra. A mi számításaink mindvégig a lapon centrált köbös kristályra vonatkoznak,

és további feladat lenne megvizsgálni a feltételezett fázisváltozások esetleges szerepét.

Azt is meg kell jegyeznünk, hogy az általunk használt modell, azaz elektronok az  $L$  pont körül a második zónában és lyukak a  $W$  pont körül az első sávban — nyilvánvalóan már nem használható kb.  $0,6\Omega_0$ -nál kisebb térfogatokra, mivel akkor a sávszerkezet számított struktúrája szerint ezen „csomók” már eltűntek (lásd 3.5.—3.10. ábrákat). Extrapolálva Bridgman (1942) eredményeit (5.3. ábra) a  $0,6\Omega_0$  atomi térfogat durván 250 kbar körüli nyomásnál következik be, ez azonban még alatta van az ellenállás maximum helyének (5.1. ábra), mely kb. 380 kbar-nál lép fel. Így az 5.3. táblázatban található eredmények kb. 250 kbar nyomásig jelentik a kalcium fajlagos ellenállásának nyomásváltozását. Meg kell jegyeznünk, hogy az  $L$  pont körül a hexagonális síkon fellépő véletlen degenerancia nem tűnik el semmiféle nyomásnál, minthogy az az  $L$  és  $W$  pontokbeli energianívók nyomás közben nem változó sorrendjének szimmetriaokok miatt fellépő szükségszerű következménye. Ez azt jelenti, hogy az alkalmazott közelítésben — melyben a spin-pálya kölcsönhatástól eltekintettünk — a kalcium soha sem válik félvezetővé, mivel e véletlen degenerancia miatt az energiasávok átfedése ugyan zérusra csökken, de energiarés, azaz tiltott sáv nem keletkezik.

A spin-pálya kölcsönhatás figyelembevétele azonban a szimmetriatengelyek mentén fellépő véletlen degeneranciák feloldásához vezet (Callaway 1964, 51. oldal), kivéve a 100 tengelyt, ahol azonban a mi esetünkben nem volt véletlen degeneráció. Példaként tekinthetjük Callaway számításait (1964, 194—195. oldal), mely a térben centrált köbös rácsra vonatkozóan mutat be egy spin-pálya kölcsönhatás okozta felhasadást. Így azt várjuk, hogy egy  $E_g$  energiarés a mi esetünkben is fellépne, ha figyelembe vennénk a spin-pálya kölcsönhatást. Ezt az  $E_g$  szélességű tiltott sáv



5.3. ábra. A kalcium relatív térfogatának ( $\Omega/\Omega_0$ ) változása a nyomással (P) Bridgman (1942) nyomán



a nyomás függvényében egy darabig még szélesedhet, de minden valószínűség szerint előbb-utóbb beáll egy nyomástól független szélesség értékre, hiszen az amúgy is gyenge spin-pálya kölcsönhatás várhatóan nem növekszik lényegesen a nyomással.

Ezek alapján  $0,6\Omega_0$ -nál kisebb atomi térfogatokra (kb. 250 kbar-nál nagyobb nyomásokon) a következőképpen képzeljük el a kalcium vezetőképességének alakulását. Közel  $0,6\Omega_0$ -nál megszűnik az alsó két vezetési sáv közötti átfedés, mivel a második sáv  $L_2$  energianívója föléje emelkedik az első sáv  $W'_2$  nivójának. Más szóval a nyomás hatására a második zónabeli elektronok mind visszanyomódtak az első zónába, megszüntetve ezáltal az ott található üres helyeket. A töltéshordozók száma csupán a termikus mozgás által keltett elektron-lyuk párokra korlátozódik. Ettől kezdve a véletlen degeneranciák helyén keletkezett  $E_g$  energiarés szerepe irányítja a jelenségeket. A tapasztalatokból arra következtethetünk, hogy ez az energiarés még kb. 380 kbar nyomásig kissé szélesedik. Ez alatt a hőmozgás mind kevesebb elektron-lyuk párt képes gerjeszteni, ezért az ellenállás még növekszik. A jelenség leírására a fajlagos ellenállásra vonatkozó egyszerű

$$\varrho = (n\mu e)^{-1} \quad (5.3.9)$$

képletet használhatjuk, ahol  $n$  a töltéshordozók száma és  $\mu$  a mozgékonyaságuk. A töltéshordozók számát, mint félvezetőknel általában, a hőmérséklet határozza meg a statisztika ismert

$$n = n_0 e^{-E_g/2KT} \quad (5.3.10)$$

képlete szerint. A  $\mu$  mozgékonyaságot a rácson való szóródások korlátozzák és értéke arányos a  $\Theta^2/T$  hányadossal (Ziman 1964, 188. oldal), ahol  $\Theta$  a Debye-hőmérséklet. Így kb. 250 kbar feletti nyomásokra az ellenállásra a következő formulát kapjuk

$$\varrho = \varrho_0 T e^{E_g/2KT} / \Theta^2 \quad (5.3.11)$$

Sajnos, a  $\Theta$  Debye-hőmérséklet kísérletileg is, elméletileg is elég pontatlanul ismert mennyiség még atmoszférikus nyomáson is. Tudomásunk szerint egyáltalán nincsen kísérleti adat arra vonatkozóan, hogyan változik  $\Theta$  mint a nyomás függvénye. Elméletileg de Launay (1954) (lásd még de Launay 1956, 285. oldal és Maradudin és mások 1963, 126. oldal) számításai szerint

$$\Theta^3 = \frac{9}{4\pi\Omega} \left( \frac{h}{q} \right)^3 \left( \frac{c_{44}}{\alpha} \right)^{3/2} \frac{9}{18 + \sqrt{3}} f(s, t), \quad (5.3.12)$$

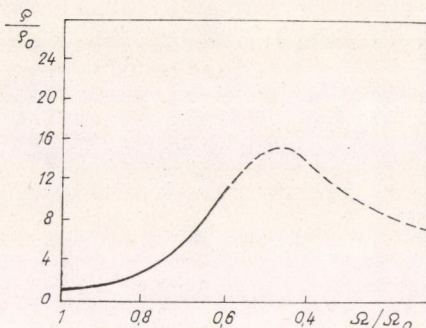
ahol  $f$  az  $s, t$  paramétereken keresztül a  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  és  $c_{44}$  rugalmassági állandók adott függvénye [ $f(s, t) = 1$  izotróp fémek esetében],  $\alpha$  a kristálysűrűség  $q$  a fonon hullám-szám. E képlet szerint  $\Theta$  növekszik, ha  $\Omega$  csökken, ami összhangban van az ún. „normál” fémek esetén azzal a várakozással, hogy a kristályrács összenyomásával a rácsrezgések amplitúdója és így az ellenállás is csökken. Így (5.3.11) szerint a kalcium  $\varrho$  fajlagos ellenállása az  $E_g$  energiaréssal nő, de a  $\Theta$  növekedésével csökken. Ezen ellentétes tendenciák eredményezik az ellenállásban fellépő maximumot kb. 380 kbar nyomásnál. Innen kezdve a kalcium már „normál” fémként viselkedik, melynek ellenállása az összezsugorodó rács hatására csökken. Nem lenne lehetetlen az eddig szabad, ill. határozatlan  $\varrho_0$ ,  $\beta$  (kompresszibilitás),  $E_g$  paramétereket a kísérleti adatokhoz igazítva a jelenséget numerikusan is leírni, tekintettel azonban a ren-



delvezésünkre álló adatok bizonytalanságára, ez nem szolgálna a jelenség pontosabb fizikai megértését, így megelégszünk azzal, hogy a nyomás ellenállás összefüggés kb. 250 kbar-nál nagyobb nyomásokhoz tartozó tartományát csak így kvantitatíve értelmezzük. Ezért az 5.4. ábrán felrajzolt  $q(\Omega/\Omega_0)$  függvénynek a szaggatott vonallal kihúzott része csak egy igen valószínű sejtés. A kísérleti adatokkal (lásd az 5.1. ábrát) való kvalitatív egyezés kielégítő.

#### 6. Néhány további kísérletileg ellenőrizhető adat

A 3. fejezetben megismert, viszonylag nagy pontosságú sávstruktúra eredmények, és a Fermi-felület alakjára vonatkozó, már jóval durvább előző fejezetbeli modell alapján lehetőségünk nyílik a kalcium fém néhány további empirikus paraméterét megbecsülni. Ezen eredmények már viszonylag kevés munkával nyerhetők, de magukon viselik a Fermi-felület, és elsősorban a lyukakhoz tartozó, a  $W$ -pont körüli tényleges  $\varepsilon(k)$  energiad függvénynek elliptikus energiadfelületekkel számított elég durva közelítésének jeleit. Ezért az e fejezetben röviden leírt empirikus paraméterek inkább tájékoztató jellegűek, habár még így is jobbakk, mint a szabad elektron-elmélet szolgáltatta közelítések. Azért is célszerűnek látszott, a teljességre való törekvés igénye nélkül, e paraméterek megbecslése, minthogy ezáltal az előző eredményeink is szemléletesebbé válnak.



5.4. ábra. A fcc kalcium fém számított relatív fajlagos ellenállása ( $\rho/\rho_0$ ) mint a relatív atomi térfogat ( $\Omega/\Omega_0$ ) függvénye. A görbének csupán a kihúzott része alapul a jelen számításokon, szaggatott része csak egy igen valószínű kvantitatív sejtés

#### 6.1. Az elektron-fajhő hőmérsékleti együtthatója a paramágneses szuszceptibilitás

Jól ismert tény, hogy fémek elektrongázának állandó térfogaton vett fajhője a hőmérséklettel arányos:

$$c_v = \gamma T. \quad (6.1.1)$$

Minthogy a rácsmozgástól származó fajhő alacsony hőmérsékleten  $T^3$ -mal arányos, ezért a hőmérséklet csökkenésével ez utóbbi gyorsabban tart zérushoz és így elég alacsony hőmérsékleten a fajhő mért hőmérsékletfüggése éppen a  $\gamma$  együttható értékét fogja megadni.

A jelenség elméletileg is jól ismert (lásd pl. Ziman 1964, 123. oldal). Eszerint

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} K^2 n(\varepsilon_F), \quad (6.1.2)$$

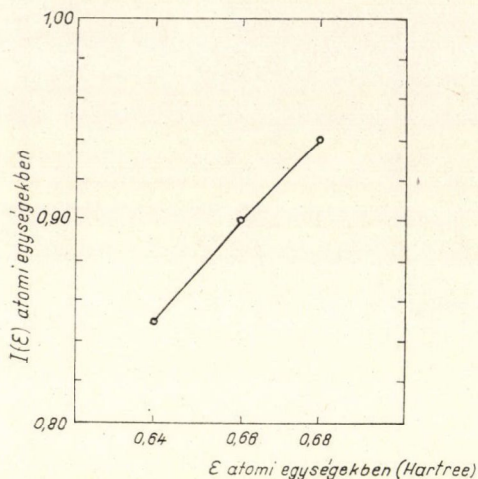
ahol  $K$  a Boltzmann-állandó, és  $n(\varepsilon)$  az energiaállapotok sűrűsége:

$$n(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{d}{d\varepsilon} \int d^3k. \quad (6.1.3)$$



E képletben az integrációs tartomány a  $k$ -térben az elektronok által betöltött tartomány. Ez most a mi esetünkben egyszerűen úgy kapható, hogy a BZ térfogatából levonjuk a  $W$  pontok körül a lyukak által elfoglalt térfogatot és hozzáadjuk az  $L$  pontok körüli elektronok által betöltött  $k$ -térbeli térfogatokat:

$$I(\varepsilon) \equiv \int d^3k = V_{BZ} - V_{\text{lyuk}} + V_{\text{elektron}} \quad (6.1.4)$$



6.1. ábra. Az elektronok által elfoglalt  $k$ -térbeli térfogat  $I(\varepsilon)$  a maximális elektron-energia ( $\varepsilon$ ) függvényében

Egyszerű modellünk szerint az elektronok gömöbsüveg, a lyukak forgásellipszoid alakú térfogatokat töltenek be, melyeknek geometriai jellemzőit az 5.1. fejezetben megismert módon bármely  $\varepsilon_F$  körüli energiaértékre kiszámíthatjuk. A numerikus értékek részletezése helyett az  $I(\varepsilon)$  függvényt a 6.1. ábrán mutatjuk be, amelyből látszik, hogy az közel egyenes, így deriváltjának, azaz az  $n(\varepsilon)$  függvénynek értéke nem túlságosan érzékeny az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia pontos megválasztására. A görbe meredekségéből

$$\frac{dI}{d\varepsilon} \cong 2,2 \text{ (atomi egységekben)}. \quad (6.1.5)$$

Ebből az  $n(\varepsilon)$  energiaállapot sűrűségfüggvény, majd a  $\gamma$  együttható meghatározható. Az eredményt a 6.1. táblázat tartalmazza. Összehasonlításképpen feltüntettük a szabad elektron elméletből adódó

$$\gamma^0 = \frac{\pi^2 K^2}{\Omega \varepsilon_{F0}} \quad (6.1.6)$$

konstans és a megfelelő  $n^0(\varepsilon_F) = \left(\frac{3}{2}\right)(n/\varepsilon_{F0})$  értékét is, ahol  $n$  az elektronok sűrűsége. A  $\gamma_{\text{Altman}}$ ,  $n(\varepsilon_F)_{\text{Altman}}$  értékek Altmannak a kalciumra vonatkozó számításaiból adódó

6.1. TÁBLÁZAT

$\gamma_A$	$1,44 \frac{\text{m J}}{\text{mol deg}^2}$	$n(\varepsilon_F)_A$	$0,62 \frac{\text{elektron}}{\text{atomi eV}}$
$\gamma_{\text{sz.e.}}$	$1,51 \frac{\text{m J}}{\text{mol deg}^2}$	$n(\varepsilon_F)_{\text{sz.e.}}$	$0,65 \frac{\text{elektron}}{\text{atomi eV}}$
$\gamma_D$	$1,78 \frac{\text{m J}}{\text{mol deg}^2}$	$n(\varepsilon_F)_D$	$0,77 \frac{\text{elektron}}{\text{atomi eV}}$
$\gamma_{\text{kísér}}l$	$2,8 \frac{\text{m J}}{\text{mol deg}^2}$	$n(\varepsilon_F)_{\text{kísér}}l$	$1,12 \frac{\text{elektron}}{\text{atomi eV}}$

A kalcium fém fajhőjének hőmérsékleti együtthatója alacsony hőmérsékleten mJ/mol deg<sup>2</sup> egységekben és az elektron állapotok sűrűsége a Fermi-energiánál energia/atom eV egységekben. Az  $A$  index Altmann, Cracknell (1964) eredményeiből, az  $\text{sz.e.}$  a szabad elektron közelítésből,  $D$  index a disszertációból számított értékeket jelenti.



értékek (Altmann, Cracknell 1964, és szóbeli közlés). A  $\gamma$  kísérleti értéke  $\gamma = 2,8$  (mjoule/mol deg<sup>2</sup>) (Roberts, 1957). A megfelelő  $n_{\text{exp}}(\epsilon_F)$  érték és  $\gamma_{\text{exp}}$  között a (6.1.2) relációt használtuk. Minthogy

$$\epsilon_{F_0} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{F_0}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (6.1.7)$$

azért, nyilvánvalóan

$$\gamma = \frac{\pi^2 K^2}{\Omega k^2} \frac{2}{(3\pi^2 n)^{2/3}} m. \quad (6.1.8)$$

Ugyanezen összefüggés definiálja az  $m_i^*$  termikus elektrontömeget a mért, vagy számított  $\gamma$  értékeken keresztül. A  $\gamma/\gamma^0$  hányados így megegyezik az  $m_i^*/m$  hányadosal, melynek a  $\gamma_{\text{szám}}, \gamma_{\text{Altm}}, \gamma_{\text{kísérlet}}$  adatokból számított értékei is megtalálhatók a 6.1. táblázatban.  $\gamma$  kísérleti értékét Roberts (1957) mérései nyomán közöljük. Az egyetlen létező kísérleti adattal való összehasonlítás azt mutatja, hogy a számított  $n(\epsilon_F)$  energiasűrűség függvénynek nagyobboknak kellene lenni, mintegy 36%-kal.

Összehasonlításképpen más számítások eredményeivel megemlítjük, hogy a viszonylag egyszerű szerkezetű alkáli fémek esetében is e „hibahatár” 5–25% között mozog (Callaway 1964, 151. oldal), az alumínium esetében a kísérleti adat közel kétszerese a számítottnak (Harrison 1960). Megjegyezzük, hogy a  $\gamma$  együtt-ható értékének kiszámításánál az elektron spinek és a töltésindukálta hosszúhátosugarú Coulomb kölcsönhatás figyelembevétele lenne még szükséges például a Pines (1955, 407. oldal) által javasolt módon.

Az is könnyen látható, hogy a számított sávstruktúra alapján a tapasztalattal való egyezés egy, a konstans energiájú felületekre vonatkozó pontosabb modell esetén lényegesen javulna. Nyilvánvaló ugyanis, hogy a lyukakhoz tartozó energiafelületeknek ellipszoidokkal való helyettesítése az  $\epsilon_F$  Fermi-energia fölötti energiákra jóval pontosabb közelítés, mint az ez alattiakra (4.5.–4.7. ábrák). A lyukak által ténylegesen elfoglalt térfogat az  $\epsilon_F$  Fermi-energia alatt egy összefüggő tartományt jelent az (100) síkon, melynek térfogata lényegesen nagyobb, mint a széttagolt ellipszoidoké, így az  $I(\epsilon)$  integrál értéke  $\epsilon_F$  alatt jóval kisebb, a differenciáhányadosa az  $\epsilon_F$  energiánál és így az  $m_i^*$  termikus tömeg is e miatt a most számított értéknél feltétlenül nagyobb, javítva a kísérleti értékkel való egyezést.

Az  $n(\epsilon)$  állapotsűrűség függvény határozza meg a  $\chi_p$  paramágneses szuszceptibilitást is:

$$\chi_p = \mu_e^2 n(\epsilon_F), \quad (6.1.9)$$

ahol  $\mu_e$  az elektron Bohr-féle mágneses momentuma. Betéve ide  $n(\epsilon_F)$  kiszámított értékét, kapjuk

$$\chi_p = 24 \cdot 5 \cdot 10^{-6} \frac{\text{erg}}{\text{mol Gauss}^2}. \quad (6.1.10)$$

Ugyanezen paraméternek a kísérleti, valamint Altmann által (Altmann, 1965, szóbeli közlés) számított értékei

$$\left. \begin{array}{l} \chi_{\text{kísérleti}} = 44 \cdot 1 \\ \chi_{\text{Altm}} = 19 \cdot 9 \end{array} \right\} \cdot 10^{-6} \frac{\text{erg}}{\text{mol Gauss}^2} \quad (6.1.11)$$



## 6.2. Elektron és lyuk koncentrációk, a töltéshordozók mozgékonyága, a Hall-együttható

Tekintettel arra, hogy a  $\sigma$  vezetőképesség kiszámításával amúgy is szükség volt a  $\tau$  relaxációs idők és az  $m^*$  effektív tömegek meghatározására, egyszerű úton kaphatunk szemléletesen értelmezhető eredményeket a címben említett további fizikai mennyiségekre. Mint az jól ismeretes a  $\mu$  mozgékonyásra

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*}. \quad (6.2.1)$$

Az (5.2.11)-ben definiált  $\tau$  relaxációs időre kapjuk:

$$\tau_{el} = 1,19 \cdot 10^{-14} \text{ sec}, \quad \tau_{lyuk} = 39,5 \cdot 10^{-14} \text{ sec}. \quad (6.2.2)$$

A lyukak jóval nagyobb mozgékonyága természetesen lényegesen kisebb effektív tömegüknek következménye (lásd 5.2. táblázatot). A töltéshordozók  $n$  koncentrációját a

$$\sigma = n|e|\mu \quad (6.2.3)$$

összefüggésből számíthatjuk. Az eredmény

$$n_{el} = 1,27 \frac{\text{elektron}}{\text{atom}}, \quad n_{lyuk} = 0,032 \frac{\text{lyuk}}{\text{atom}}, \quad (6.2.4)$$

vagyis a lyukak atomonkénti száma elenyésző az elektronokéhoz képest. Nagy mozgékonyáguk révén azonban mégis tekintélyes részt vállalnak a kalcium elektromos vezetőképességének kialakításában (lásd 5.3. táblázatot).

Mint ismeretes, az  $R$  Hall-együttható a töltéshordozók effektív számáról ad felvilágosítást, (Ziman 1960)

$$n = \frac{R|e|c}{\Omega} \left( \frac{\text{részecske}}{\text{atom}} \right). \quad (6.2.5)$$

Felhasználva  $R$  kísérletileg mért értékét, Ziman után (1960, 488. oldal) írható:

$$n_{kísér} = -1,4 \left( \frac{\text{részecske}}{\text{atom}} \right). \quad (6.2.6)$$

Az egyezés a számított  $n_{el}$  értékkel jónak mondható. Mint ismeretes, a szabad elektron elmélet alapján a töltéshordozók atomonkénti száma megegyezik a szabad atomról leszakadt, „közössé vált” elektronok számával, azaz a valenciaelektronok számával, a kalcium esetében 2-vel. Az elektronok nem teljesen szabad voltának egyik következménye az, hogy — effektíve csak mintegy 1,3 el/atom vesz részt az elektromos vezetési tulajdonságok kialakításában.



### 6.3. Ultrahang abszorpció, mágneses térbeli ellenállásváltozás, a kalcium lágy röntgen spektruma

A Fermi-felület kimérésének legkényelmesebb módszere lenne az ultrahang abszorpciójának mérése, mivel az elmélet szerint az elektronrács kölcsönhatás miatt mágneses térbe helyezett fémnél a  $\lambda$  hullámhosszúságú ultrahang rezonancia jellegű abszorpciót szenved, ha az alkalmazott  $H$  mágneses térre fennáll (Ziman 1964, 168. oldal)

$$\frac{1}{H} = (n + 1/2) \frac{e\lambda}{\hbar c 2k_y}, \quad (6.3.1)$$

ahol  $n$  egész szám és  $2k_y$  a Fermi-felületnek a  $H$ -ra merőleges síkban mért átmérője azon pontok között, melyekben a hanghullámok által az elektronokra gyakorolt elektromos térerő iránya párhuzamos az elektron sebességével. Bár a pontosabb elmélet szerint a (6.3.1) képlet valamivel bonyolultabb, mégis kísérleti tény, hogy az ultrahang valóban rezonanciaszerű abszorpciót mutat és ezek a  $H$  változtatásakor  $1/H$ -ban periodikusan jelentkeznek. Sajnos, a kísérletek meglehetősen bonyolultak, és a kalciumra még nem ismeretes mérési eredmény.

A rendelkezésünkre álló modell alapján azonban könnyű tájékoztató jellegű számokat mondani a periódus várható nagyságáról:

$$\Delta \equiv \frac{e\lambda}{\hbar c 2k_y} = 0,0804 \left( \frac{\lambda}{2k_y} \right) (\text{Gauss})^{-1}. \quad (6.3.2)$$

Itt  $\lambda$ -t cm-ben,  $k_y$ -t egységekben kell helyettesíteni. Például egy  $\lambda = 5 \cdot 10^{-3}$  cm hullámhosszúságú ultrahang esetén, ha a  $H$  mágneses tér a kalcium egy kristály (1, 1, 1)-tengelye irányába mutatna, akkor a várható periodicitás nagyság az  $1/H$  függvényében

$$\Delta \approx 0,7 (k \text{ Gauss})^{-1}. \quad (6.3.3)$$

A mágneses ellenállásváltozásra vonatkozóan sincsen még kísérleti adat, habár ez inkább csak kvalitatív értékű kísérlet annak eldöntésére, hogy a reciprokok térben az elektronpályák nyitott vagy zárt pályák, amiből a Fermi-felület topológiájára lehet következtetni. Modellünkéből világos, hogy nyitott pályáról egyáltalán nem beszélhetünk, így a mágneses térbeli ellenállás valamint a Hall-együttható  $H$ -val négyzetesen kell hogy növekedjék, a nyitott pályákra jellemző telítődés fellépte nem várható.

A lágy röntgenspektrum alakja a (6.1.3)-ban definiált  $n(\varepsilon)$  energia állapotsűrűség függvényével hasonlítható össze. Mi ezt azonban csak az  $\varepsilon_F$  Fermi-energia környezetében ismerjük. A spektrum szélessége a vezetési sáv betöltött részének szélességét adja meg. Nálunk a vezetési sáv tetején három sáv is átfedi egymást, a  $4s$ ,  $4p$  és  $3d$  sávok, meglehetősen komplikált hibridizált szerkezettel, így a kiértékelés csak kvalitatív jellegű. A röntgenspektrum mért szélessége 3 eV (Kingston 1951), melyet az  $\varepsilon_F$  Fermi-nívó magasságával hasonlíthatunk össze. Ez egy  $\varepsilon_F = 0,33 \text{ ry} = 4,5 \text{ eV}$  szélességű sávot eredményezne. Összehasonlításképpen megjegyezzük, hogy a szabad elektronelmélet szerint  $\varepsilon_{F_0} = 0,344 \text{ ry} = 4,7 \text{ eV}$ , Altman és Cracknell (publikálatlan eredmény) szerint  $\varepsilon_F = 0,375 \text{ ry} = 5,1 \text{ eV}$  lenne. A mért értékekkel való egyezés javítható lenne az átmeneti mátrixelemek és az elektron-kölcsönhatások figyelembevételével (Ziman 1964, 238. oldal).



Végezetül e helyen szeretnénk néhány szót szólni a disszertációval kapcsolatos numerikus munkákról. Ezek zömét, elsősorban a 3. és 4. fejezetekhez tartozó számításokat a cambridge-i, ill. az oxfordi egyetemek matematikai laboratóriumában végeztük, TITAN, ill. KDF9 nevű elektronikus digitális számológépeken. A programokat részben a TITAN autokódján, részben ALGOL-ban írtuk. Tekintettel a numerikus munkák meglehetősen hosszadalmas voltára, a disszertáció terjedelmét nem akartuk tovább növelni még e programok vázlatos leírásával sem. Természetesen a részletek iránt érdeklődő olvasó számára készségesen nyújt bármilyen további felvilágosítást a disszertáció szerzője.

### 7. Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet szeretném kifejezni mindenekelőtt dr. Kónya Albert professzor úrnak, aspiránsvezetőmnek értékes szakmai tanácsaiért, munkám során tanúsított állandó érdeklődéséért, buzdításáért, messzemenő támogatásáért.

Köszönettel tartozom Szalay Sándor professzor úrnak azért, hogy az ATOMKI-ban nyugodt, a kutatási munkának kedvező légkörben lehetőséget nyújtott a disszertáció elkészítésére.

Prof. N. Mott (Cavendish Laboratory, Cambridge) és Prof. W. Hume-Rothery (Department of Metallurgy, Oxford) szíves vendéglátását ez úton is szeretném megköszönni. Angliai tanulmányutam kapcsán különösen Volker Heine és Alex Animalu cambridge-i, valamint Simon Altmann oxfordi kutatókkal folytatott számos hasznos megbeszélésért, valamint azért, hogy eredményeiket még publikálás előtt rendelkezésemre bocsátották, fejezem ki hálámat.

Hálával tartozom a cambridge-i és az oxfordi egyetemek matematikai laboratóriumaiban dolgozó munkatársaknak, akik az elektronikus számológépek használatát lehetővé tették számomra, és a programozás elsajátításában segítségemre voltak.

Köszönet illeti a Tudományos Minősítő Bizottságot, hogy számomra a hat hónapos angliai tanulmányutat lehetővé tette.

Közvetlen ATOMKI-beli munkatársaimnak, elsősorban Berényi Dénesnek és csoportjának is szeretném megköszönni bizalmukat és türelmüket, melyet a velük való együttműködés közben tanúsítottak azért, hogy ez a disszertáció elkészülhessen.

Végül, de nem utolsósorban hálás köszönetet mondok Kovács Magda és Szabó Béla munkatársaimnak, akik a disszertáció technikai kivitelezésében nyújtottak értékes segítséget.



# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## KVANTUMMECHANIKA ÉS CSOPORTELMÉLET\*

H. WEYL

Bevezetés és összefoglalás. — I. rész. Fizikai mennyiségek reprezentálása hermitikus alakok segítségével. 1. § Az hermitikus alakokat illető matematikai alapfogalmak. 2. § A tiszta eset fizikai fogalma. 3. § A reprezentáló hermitikus alak fizikai jelentése. 4. § Keverékek statisztikája. — II. rész. Kinematika, mint csoport. 5. § Csoportokról és unitér ábrázolásaikról. 6. § Általánosítás folytonos csoportokra. 7. § A kanonikus változók helyettesítése a csoporttal. Az elektron. 8. § Áttérés Schrödinger hullámméltéltére. — III. rész. A dinamikai probléma. 9. § Az időbeli változás törvénye. Időbeli középértékek. 10. § Kinetikus energia és Coulomb-erő a relativisztikus kvantummechanikában. — Matematikai függelék.

### Bevezetés és összefoglalás

A kvantummechanikában két jól megkülönböztethető kérdéssel állunk szemben: 1. Miképpen kapható meg azon hermitikus alak mátrixa, amely egy ismert szerkezetű fizikai rendszerre jellemző, adott mennyiséget reprezentál? 2. Ha megvan az hermitikus alak, mi a fizikai jelentése; milyen fizikai kijelentéseket nyerhetünk belőle? A második kérdésre Neumann nemrég megjelent munkájában<sup>1</sup> világos és messzeható választ adott. Ez a válasz azonban még nem mond el mindent, ami erre vonatkozóan mondható, amellet nem fogja át valamennyi, a fizikai szakirodalomban eddig sikerrel érvényesített szempontot. Úgy vélem, ebben a vonatkozásban sikerült a problémát bizonyos fokig lezárnom a *tiszta eset*<sup>2</sup> fogalmának felállításával. Pl. atomokról szólva, tiszta esettel olyankor állunk szemben, ha az atomok vizsgált halmaza a legnagyobb fokú homogenitással rendelkezik, ami csak megvalósítható. A monokromatikus polarizált fénysugár más területről példa. A tiszta esetet az hermitikus alak *változói* reprezentálják; az *alak* maga arról nyújt felvilágosítást, hogy az általa reprezentált mennyiség *ezekezt az értékeket valamely adott tiszta esetben milyen valószínűséggel vagy gyakorisággal veszi fel*. A tiszta eset ezen elméletén alapszik azután a *keverékek statisztikája*; a probléma Neumanntól származó megközelítése e területen pusztán egy meghatározott kérdésre vonatkozott.

A II. rész az I. kérdéssel foglalkozik, mely mélyebbre hatol. Ez a kérdés a legszorosabban összefügg a *kanonikus változók* mibenlétének és helyes definíciójának

\* Zs. f. Phys. 46, 1, 1928.

<sup>1</sup> Mathematische Begründung der Quantenmechanik, Nachr. Gesellsch. d. Wissensch. Göttingen 1927. 1. old.

<sup>2</sup> Mint v. Neumann úr közölte velem, időközben ő is bevezette ezt a fogalmat. [Megjegyzés korrektúrájánál.]



kérdésével. Ebben az irányban Jordan tett kísérletet<sup>3</sup>, mely a problémát a maga általánosságában jelenítette meg. Mindamellett megfontolásaiban komoly hiányosságot találunk: definícióiból és axiómáiból nem tűnik ki, hogy a  $q$  helykoordináta  $f(q)$  függvényeihez azt az  $f(Q)$  mátrixot kell rendelnünk, mely a  $q$ -t előállító  $Q$  mátrixból ugyanazon függvénytáblázat szerint képzendő; még kevésbé esik szó ebben a vonatkozásban a hely- és impulzus-koordináták függvényeiről. E kiegészítés nélkül azonban Jordan skémája tartalmatlan. Azonfelül a kanonikus változókra megadott definíciója matematikailag nem kielégítő és fizikailag tarthatatlan. Úgy vélem, itt a csoportelmélet segítségével sikerült a valóságos tényállásba mélyebben bepillantanom.<sup>4</sup> A kanonikus párosítás benső, elvi oka világosan kitűnik: ez akkor áll elő, ha az alapul vett csoport folytonos csoport; nézőpontunk azonban átfogja a diszkrét eseteket is, amilyen a *mágneses elektron* (négyescsoport), ahol már nem beszélhetünk értelmes módon kanonikus párosításról. A folytonos tartományban a differenciális nézőponttal szemben az *integrális álláspontot* fogom érvényre juttatni, amennyiben az infinitezimális csoportot, melyhez a megfogalmazás eddig kapcsolódott, a teljes folytonos csoporttal helyettesítem. Az áttérés Schrödinger hullámeqyenletére ekkor teljes szigorúsággal elvégezhető. Nézőpontom további sikereként szeretném megemlíteni: lehetővé teszi, hogy a funkcionális kifejezést, amely az adott mennyiséget — pl. az energiát — a kanonikus változók segítségével előállítja, *egyértelmű* előírás alapján átvigyük mátrixokra, bármilyen függvényekről legyen is szó; az eddigi megfogalmazás valójában csak polinomokra vonatkozott, s még akkor is eldöntetlen maradt, vajon egy monom, mint pl.  $p^2q$ , a mátrixkalkulusban mint  $p^2q$ ,  $qp^2$  vagy  $pqp$ , vagy pedig mindezek valamely kombinációjaként értelmezendő.

Ahhoz, hogy ezt valamely konkrét esetben keresztülvigyük, szükség van a *dinamikai probléma* megoldására. Feladatunk alapján: a csoportalgebra mennyiségei között megtalálni azokat, amelyek a mérésel meghatározható helyet és időt jelentik. Ez idő szerint a rendelkezésre álló skéma csupán arra az esetre vonatkozik, amikor az idő mint egyedüli független változó lép fel (a térelméletet így zárjuk), s ezenkívül az idő *csupán* független változóként, s nem pedig valóságos állapotjellemzőként szerepel (ezzel kizárjuk a voltaképpeni relativisztikus mechanikát). Mindamellett, legalább is a kinetikus energia relativisztikus kifejezése minden további nélkül átvihető a kvantummechanikába. Mindezeket az utolsó fejezetben tárgyalom, inkább az általános elmélet megvilágítására. A Schrödinger-féle hullámeqyenletnek itt nem igazi differenciálegyenletek felelnek meg; a közönséges differenciálás helyét a differenciáláshoz hasonló eljárások foglalják el.

A szükséges matematikai fogalmakat és tényeket beiktatott szakaszokban ismertetem röviden. A Függelék tartalmazza az elmélet legfontosabb matematikai alapjainak bizonyítását. Azt remélem, ezzel inkább teszek szolgálatot a fizikus olvasónak, mintha a matematikai irodalomra utalnék, mely a számára szükséges ismereteket legtöbbször olyasmivel összekapcsolva nyújtja, ami nem érdekli őt.

<sup>3</sup> Über eine neue Begründung der Quantenmechanik, ZS. f. Phys. **40**, 809, 1927; **44**, 1, 1927. Vö. továbbá P. A. M. Dirac, Proc. Royal Soc. (A) **113**, 621, 1927, és D. Hilbert, J. v. Neumann, L. Nordheim, Über die Grundlagen der Quantenmechanik, Math. Ann. **98**, 1, 1927.

<sup>4</sup> A kvantummechanika ezen összekapcsolása a csoportelmélettel egészen más irányba esik, mint Wigner úr vizsgálatai, melyek mutatják, hogy a szinképek tulajdonságait — kvalitatív oldalról tekintve — az alapul szolgáló szimmetriacsoport határozza meg (több munka a ZS. f. Physikben, **40**, 492 és 883; **43**, 624, 1926/27).



## I. rész. Fizikai mennyiségek reprezentálása hermitikus alakok segítségével

1. § Az hermitikus alakokat illető matematikai alapfogalmak. A címben említett alapfogalmakat, alapvető tényeket itt a többdimenziós analitikus geometria nyelvezete segítségével foglalom össze röviden. A közönséges  $n$ -dimenziós geometriától az eltérés abban áll, hogy az

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1)$$

vektorok komponensei nemcsak valós, hanem tetszőleges komplex számok lehetnek, s hogy ennek megfelelően valamely vektor abszolútértékének négyzetét az

$$|\mathbf{x}|^2 = x_1 \bar{x}_1 + x_2 \bar{x}_2 + \dots + x_n \bar{x}_n \quad (2)$$

„Hermite-féle egységforma” adja meg; ez képezi a metrika alapját. (A felülvonás a konjugált komplex mennyiségre való áttérést jelenti.) Az (1) vektorok a szokott módon számokkal szorozhatók és összeadhatók. Ezek a vektorok  $n$ -dimenziós lineáris sokaságot képeznek, az  $\mathfrak{R}_n$  vektorteret vagy *vektortestet*; azaz kiválaszthatunk valamilyen módon  $n$  számú  $\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \dots, \mathbf{e}_n^*$  vektort, úgyhogy minden  $\mathbf{x}$  vektor egy- és csak egyféleképpen állítható elő az

$$\mathbf{x} = x_1^* \mathbf{e}_1^* + x_2^* \mathbf{e}_2^* + \dots + x_n^* \mathbf{e}_n^*$$

alakban. Ha pl.  $\mathbf{e}_i^*$ -ot az  $\mathbf{e}_i = (0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0)$  vektorral választjuk egyenlőnek (az egyes az  $i$ -edik helyen áll), úgy  $\mathbf{x}$ -nek az  $(\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \dots, \mathbf{e}_n^*)$  koordinátarendszerre vonatkoztatott  $x_i^*$  komponensei egybeesnek az  $x_i$  „abszolút komponensekkel”. Az olyan koordinátarendszert, amelyben  $\mathbf{x}$  abszolútértékének négyzete a tetszőleges  $\mathbf{x}$  vektor  $x_i$  komponenseivel a (2) képlet által megadott alakban fejezhető ki, *normális* koordinátarendszernek fogjuk nevezni. Minden normális koordinátarendszert egyenlőségnek tekintünk; a mi aritmetikai kiindulópontunknak megfelelő  $(\mathbf{e}_i)$  speciális koordinátarendszernek semmilyen kitüntetett szerepet nem tulajdonítunk. A következőkben éppen ezért  $\mathbf{e}_i$  tetszőleges normális koordinátarendszert jelent,  $x_i$  pedig az  $\mathbf{x}$  vektornak erre vonatkoztatott komponenseit. Az áttérést az  $\mathbf{e}_i$  koordinátarendszerről valamely más  $\mathbf{e}_i'$  rendszerre a következő általános képletek írják le:

$$\mathbf{e}_i' = \sum_k e_{ik} \mathbf{e}_k, \quad x_k = \sum_i e_{ik} x_i'. \quad (3)$$

A feltételek, melyeket az  $e_{ik}$  együtthatóknak teljesíteniök kell ahhoz, hogy (3) „unitér transzformáció” legyen, mely két normális koordinátarendszer között ad meg összefüggést, könnyen megkaphatók a definícióból, és pontosan megfelelnek az elemi analitikus geometriából megszokott feltételeknek. Ha  $E$  az  $\|\mathbf{e}_{ik}\|$  mátrixot jelöli, a  $*$  pedig a mátrix transzponálását — sorainak és oszlopainak felcserélését — jelenti, végül  $\mathbf{1}$  az azonosságot reprezentáló egységmátrix jele, úgy e feltételek:

$$E E^* = E^* E = \mathbf{1}.$$

A (3) képletek — ezeket most inkább az

$$x_k' = \sum_i e_{ik} x_i \quad (4)$$

alakban írrom fel — tudvalevőleg még egy második módon is értelmezhetők. Azok — az  $\mathbf{e}_i$  vektorok alkotta rögzített, normális koordinátarendszer választása mellett —



a vektortér  $r$  önmagára való unitér leképezését írják le. Ez a leképezés az  $\mathbf{x} = \sum x_i \mathbf{e}_i$  vektorhoz az  $\mathbf{x}' = \sum x'_i \mathbf{e}_i$  vektort rendeli. Ezt a leképezést röviden így jelölöm:  $\mathbf{x}' = \mathbf{x}E$ . Ekkor két leképezés,

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x}E \quad \text{és} \quad \mathbf{x}'' = \mathbf{x}'E'$$

összetevését természetesen  $\mathbf{x}'' = \mathbf{x}(EE')$  fejezi ki (itt  $E$  és  $E'$  balról jobbra követik egymást, annak megfelelően, ahogy olvasni szoktunk); így összhangban maradunk a mátrixszámitás megszokott megállapodásával, mely szerint az

$$E = \|e_{ik}\|, \quad E' = \|e'_{ik}\|$$

mátrixokból kompozíció útján a

$$\sum_r e_{ir} e'_{rk}$$

elemekkel rendelkező  $EE'$  mátrix áll elő. Geometria nézőpontunk azt jelenti, hogy a vektortérben csak olyan viszonyokat tanulmányozunk, amelyek invariánsak tetszőleges unitér leképezéssel szemben. Célszerű még (2) mellett az  $\mathbf{x}$  és  $\mathbf{y}$  vektorok  $(\mathbf{xy})$  skaláris szorzatát is bevezetni az

$$(\mathbf{xy}) = x_1 \bar{y}_1 + x_2 \bar{y}_2 + \dots + x_n \bar{y}_n$$

definícióval;  $(\mathbf{yx})$  konjugáltja  $(\mathbf{xy})$ -nak. Két vektort egymásra *merőlegesnek* akkor mondunk, ha skaláris szorzatuk eltűnik.

Két, zérustól különböző vektor ugyanazon *sugárhoz* tartozik, ha az egyik a másiktól valamely (komplex, zérustól különböző) számmal való szorzás útján áll elő. Valamely sugár egyértelműen jellemezhető egy hozzátartozó egységnyi abszolútértékű  $\mathbf{x}$  vektor (egységvektor) segítségével. Ezt azonban a sugár nem határozza meg egyértelműen;  $\mathbf{x}$  helyére ugyanolyan joggal léphet bármely  $\varepsilon \mathbf{x}$  vektor, mely  $\mathbf{x}$ -ből tetszőleges, egységnyi abszolútértékű  $\varepsilon$  számmal való szorzás útján áll elő. Itt tehát másként áll a helyzet, mint a közönséges térben, ahol csak az előjel (egy  $\pm 1$  tényező) kétértelműsége marad fenn. Ha a (4) unitér leképezést nem a vektor-, hanem a sugártest leképezéseként fogom fel (homogén nézőpont), úgy neve legyen röviden *elforgatás*. Ha  $E' = \varepsilon E$ , ahol az  $\varepsilon$  szám — mint a következőkben mindenütt — egységnyi abszolútértékű, akkor  $E$  és  $E'$  ugyanazt az elforgatást állítja elő:  $E \simeq E'$ .

Egy *hermitikus alak* az  $\mathbf{x} = (x_i)$  tetszőleges vektor<sup>5</sup>

$$A(\mathbf{x}) = \sum_{i,k=1}^n a_{ik} x_i \bar{x}_k \quad (5)$$

alakú függvénye, melynek  $a_{ik}$  együtthatói teljesítik az

$$a_{ki} = \bar{a}_{ik} \quad \text{vagy} \quad \bar{A}^* = A \quad (6)$$

szimmetriafeltételt. Itt  $A$  az együtthatók  $\|a_{ik}\|$  mátrixát jelöli az éppen használt koordináta-rendszerben. Itt is célszerű, ha ezzel kapcsolatban bevezetjük az

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i,k} a_{ik} x_i \bar{y}_k$$

<sup>5</sup> Az alakokat és mátrixokat mindenkor latin nagybetűkkel jelöljük.



bilineáris alakzatot. A szimmetria-feltétel folytán

$$A(y, x) = \overline{A(x, y)};$$

ez éppen a szimmetria-feltételnek a koordinátarendszer választásától független írásmódja. Speciálisan fennáll:  $\overline{A(x)} = A(x)$ , vagyis: az hermitikus alak által felvett értékek valósak; értéke nem változik, ha az  $x$  argumentum-vektort  $ex$ -szel helyettesítjük. Minden  $A$  hermitikus alakhoz unitér-invariáns módon hozzátartozik egy  $x' = xA$  leképezés, melynek ugyanaz a koefficiens-mátrixa. A hozzárendelés invariáns mivolta kitűnik abból, hogy a leképezés az  $x$  vektornak azt az  $x'$  vektort felelteti meg, mely  $y$ -ban azonosan eleget tesz az

$$(x'y) = A(xy)$$

egyenletnek.

Az hermitikus alakokra vonatkozó alapvető tény a *főtengely-transzformációra* vonatkozó *tétel*: Választható  $A$ -hoz egy  $e_i$  normális koordinátarendszer oly módon, hogy abban

$$A(x) = a_1 x_1 \bar{x}_1 + a_2 x_2 \bar{x}_2 + \dots + a_n x_n \bar{x}_n \quad (7)$$

lesz. Az  $a_1, a_2, \dots, a_n$  *sajátértékeket* az hermitikus alak egyértelműen meghatározza (természetesen csak a sorrendtől eltekintve). Ami a megfelelő  $e_i$  *sajátvektorokat* vagy *főtengelyeket* illeti, egyértelmű meghatározottságukkal a helyzet a következő. Egyezzenek meg egymással pl. az  $a_1, a_2, a_3$  sajátértékek ( $=a$ ), s legyenek a többiektől különbözők. Ekkor az  $a$  sajátértékhez az  $e_1, e_2, e_3$  alapvektorok által kifeszített  $\mathfrak{R}(a)$  háromdimenziós sajátter tartozik, mely az összes  $x_1 e_1 + x_2 e_2 + x_3 e_3$  alakú  $x$  vektorból áll; e térben  $(e_1, e_2, e_3)$  normális koordinátarendszert képez. A *szám-szerűen különböző*  $a', a'', \dots$  sajátértékekhez tartozó  $\mathfrak{R}(a'), \mathfrak{R}(a''), \dots$  altereket, melyek egymásra merőlegesek,  $A$  egyértelműen meghatározza; azonban mindegyikükben tetszésünk szerint választhatunk normális koordinátarendszert. Az utóbbi az adott példában azt jelenti, hogy  $x_1, x_2, x_3$  egymás között még tetszőleges unitér transzformációnak vethető alá anélkül, hogy ez a (7) normálalakot elrontaná.

Két hermitikus alak,  $A$  és  $B$ , *egyidejűleg* akkor és csak akkor transzformálható főtengelyekre, ha a megfelelő koefficiens-mátrixok felcserélhetők:  $AB = BA$ . Hasonló tétel érvényes kettőnél több hermitikus alakra, mégpedig akár véges számú, akár végtelen sok ilyen alak halmazával állunk szemben.

2. § *A tiszta eset fizikai fogalma.* A mágneses elektront tárgyalom példaképpen, mivel itt igen egyszerűek (habár klasszikus szemszögből tekintve paradoxok) a viszonyok. Goudsmit és Uhlenbeck feltevése szerint, mely azóta kiválóan beigazolódott, az elektronnak saját impulzusmomentumot kell tulajdonítanunk, melynek tetszőleges komponense — pl. az  $x$ -irány menti  $\sigma_x$  komponens — csak a  $+1$  és  $-1$  értékeket veheti fel, ha egységnek  $\hbar/4\pi$ -t választjuk. Elgondolhatjuk, hogy adott elektronáramból — az atomok iránykvantálásának igazolására szolgáló, jól ismert Stern—Gerlach-kísérlethez hasonló eljárással — kiválasztjuk azoknak az elektronoknak a seregét, amelyekre  $\sigma_x$  a  $+1$  értéket veszi fel. Feltesszük, hogy ezen  $\mathfrak{S}_x$  sereg elektronjaira nem hat semmilyen perturbáció, úgyhogy valamennyi elektronra  $\sigma_x$  értéke tartósan és bizonyossággal  $+1$ . Az elektronok ilyen halmaza esetében (amennyiben még elvonatkozunk az elektron helyétől és sebességétől) „*tiszta eset*”-tel állunk szemben: belső homogenitása oly mértékű, hogy az elvileg már nem fokoz-



ható tovább. Minden fizikai kérdésre ugyanis, melyet reá vonatkozóan értelemszerűen feltehetünk, *eleve megadható, számszerűen meghatározott* választ kapunk. Minden ilyen kérdés a következő típusú: Ha  $r$  valamilyen irányt jelöl, mi a valószínűsége annak, hogy az  $\mathfrak{S}_x$  sereg valamely elektronjára  $\sigma_r$  a  $+1$  vagy  $-1$  értéket veszi fel. A számszerűen meghatározott válasz a következőképpen hangzik: Legyen  $\vartheta$  az  $r$ -irány és az  $x$ -irány közbezárt szöge; úgy a szóban forgó két valószínűség értéke

$$= \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \quad \text{és} \quad = \sin^2 \frac{\vartheta}{2}.$$

A valószínűséget úgy kell érteni, hogy ez jellemzi a gyakoriságot az elektronok seregében; ha elvégeznénk a kiválasztási kísérletet az  $r$ -irányban, az a két résznyaláb intenzitásarányán keresztül nyilatkoznék meg.<sup>6</sup> Ha kezdetben az  $x$ -irány helyett egy másik,  $x'$ -irányt vettünk volna alapul, úgy egy másik tiszta eset (az  $\mathfrak{S}_{x'}$  elektron-sereg) adódott volna. Ebben  $\sigma_r$ -nek az értéke  $\cos^2 \frac{\vartheta'}{2}$  valószínűséggel  $+1$ ,  $\sin^2 \frac{\vartheta'}{2}$  valószínűséggel  $-1$ , ahol  $\vartheta' = \angle(r, x')$ ; speciálisan  $\sigma_{x'}$  értéke bizonyossággal  $+1$ . Ez a tiszta eset *különbözik* az előbbtől, minthogy ugyanazokra a fizikai kérdésekre itt más numerikus válaszokat találunk. Annyi különböző tiszta eset van, ahány különböző  $x$ -irány. Az ilyen tiszta  $\mathfrak{S}_x, \mathfrak{S}_{x'}, \dots$  elektronáramokból tetszőleges arányú *keverékek* állíthatók elő. Annak gyakorisága, hogy egy ilyen keverék-áramban  $\sigma_r = +1$  vagy  $-1$  adódik, a keverési aránytól függ. Itt megfordítva — arra vagyunk ráutalva, hogy a kísérletileg megfigyelt gyakoriságokból következtessünk a keverék-áram összetételére. Ez a különbség a tiszta eset és a keverék között analóg a „tiszta vonal” (a tiszta vonalon belül érvényesek az átöröklés Mendel-féle törvényei) és a „populáció” (erre vonatkoznak Galton törvényei) biológiai fogalmaival. Itt is, akárcsak ott, fontos feladata a kísérletező művészetének a tiszta vonalak izolálása. Megítélésem szerint különbséget tenni a tiszta esetek elmélete és a keverékek statisztikája között alapvetően fontos ahhoz, hogy helyesen fogjuk fel a kvantummechanika értelmét.

A tényállás, ami az elektronok seregét illeti, amint azt a fentiekben leírtam, egyáltalán nem paradox. Sereg helyett a jövőben egyes elektronokról, s ennek megfelelően gyakoriság helyett valószínűségekről fogok beszélni. Némiképp paradox módon csupán az a kijelentés hangzik, hogy  $\sigma_x$  egy vektornak — az impulzusmomentumnak — az  $x$ -irány menti komponense. Ez ugyanis, ha a térben bevezetjük az  $xyz$  derékszögű koordinátarendszert és az  $r$  tetszőleges irány iránykoszinuszait  $a$ -val,  $b$ -vel és  $c$ -vel jelöljük, maga után vonja a

$$\sigma_r = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z \quad (8)$$

egyenletet. Miképpen egyeztethető össze ez azzal a körülménnyel, hogy  $\sigma_r$ , akárcsak  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ , csupán a  $\pm 1$  értékeket veheti fel? Valamely adott tiszta esetben azonban az itt fellépő mennyiségek egyáltalán nem rendelkeznek bizonyossággal megadható értékkel, úgyhogy először is a (8) egyenlet értelme, ha azt a megszokott módon

<sup>6</sup> Habár ily módon  $\mathfrak{S}_x$  ismét felbontható, az így nyert résznyalábok nem homogénabbak, mint maga  $\mathfrak{S}_x$ . A helyzet pontosan ugyanaz, mint a fénysugár esetében, mely két, egymáshoz képest elforgatott Nicol-prizmán haladt át: az ugyanolyan természetű, mint az a fény, mely csak a második Nicol-prizmán haladt át.



a fizikai mennyiségek *értékeire* akarjuk vonatkoztatni, teljesen a levegőben lóg. Tartalmat csak akkor nyer majd, ha a fizikai mennyiségeket olyan matematikai objektumok segítségével állítjuk elő, amelyek valós számokkal megszorozhatók és egymáshoz hozzáadhatók. — És mit jelentsen másodsor az, hogy ez a  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  komponensekkel rendelkező vektor „impulzusmomentum”? Ezzel nyilvánvalóan az ezen mennyiségeknek az elektron környezetében uralkodó ( $H_x, H_y, H_z$ ) mágneses térrel szemben mutatott meghatározott viselkedésére vonatkozóan teszünk kijelentést. Ha az elektront egészen naiv módon mint pörgő golyócskát gondoljuk el, melyben a töltés- és tömegsűrűség viszonya mindenütt konstans, úgy a Hamilton-féle energiafüggvényben fellép a

$$\mu(H_x\sigma_x + H_y\sigma_y + H_z\sigma_z) \quad (9)$$

tag fele; itt  $\mu = \frac{eh}{4\pi mc}$  a Bohr-magneton ( $e$  az elektron töltése,  $m$  a tömege,  $c$  a fénysebesség). Goudsmit és Uhlenbeck feltevésének spektroszkópai sikere — mint ismeretes — azon alapszik, hogy az elektronnra vonatkozóan a (9) kifejezést az  $1/2$  tényező nélkül tekintjük helyesnek. Itt ismét szükséges, hogy a (9) kifejezés értelmét megértsük, ami feltételezi a  $\sigma$  mennyiségek összeadhatóságát; azonfelül tudnunk kell még, miképpen határozza meg a Hamilton-féle energiafüggvény a dinamikai történetét.

3. § *A reprezentáló hermitikus alak fizikai jelentése.* Az hermitikus alakok kalkulusa minden tekintetben megfelel a követelményeknek, melyek az imént kifejtett programból adódnak. Minden fizikai mennyiséget egy-egy hermitikus alak reprezentál; az adott rendszerhez tartozó összes fizikai mennyiségnek a reprezentánsai ugyanazon  $x_i$  változóktól függő hermitikus alakok. A fizika nehezebb része: megállapítani a szabályokat, melyek alapján valamely fizikai mennyiséghez megtalálhatjuk a reprezentáló alakot és annak mátrixát. Itt először arról kívánok szólni, hogy mi ennek a mátrixnak a fizikai jelentése. A vektortér dimenziószámát, vagyis az  $x$  változók  $n$  számát végesnek veszem, habár az a legtöbb esetben végtelen nagy. Mindaz, amit mondok, a végtelen dimenziós vektortérre analóg módon kiterjeszthető. Az elektron fent tárgyalt példájában  $n=2$ .

Egy-egy tiszta esetet  $n$ -dimenziós vektortérünknek egy-egy  $x$  egységvektora jellemez; az egyes  $\alpha$  fizikai mennyiségeket egy-egy  $A$  hermitikus alak jellemzi ebben a térben. Alkalmas  $e_1, e_2, \dots, e_n$  normális koordinátarendszer bevezetésével transzformáljuk  $A(x)$ -et főtengelekre:

$$A(x) = a_1 x_1 \bar{x}_1 + a_2 x_2 \bar{x}_2 + \dots + a_n x_n \bar{x}_n \quad (x = x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_n e_n). \quad (10)$$

Az  $a_1, a_2, \dots, a_n$  sajátértékek jelentik azokat az értékeket, amelyeket az  $\alpha$  fizikai mennyiség egyáltalán felvehet; az  $|x_1|^2, |x_2|^2, \dots, |x_n|^2$  számok azokat a  $W(x)$  valószínűségeket jelentik, amelyekkel az  $x$  tiszta esetben  $\alpha$  ezeket az értékeket felveszi. Az összegük egy, mivel  $x$  egységvektor. Az állítás második részét még bizonyos mértékig precizíroznunk kell arra az esetre, amikor több sajátérték megegyezik egymással. Legyen ismét  $a_1 = a_2 = a_3 = a$  a többi sajátértéktől különböző; ekkor az  $a$  sajátértékhez az  $e_1, e_2, e_3$  sajátvektorok kifeszítette háromdimenziós  $\mathfrak{R}(a)$  sajátter tartozik. Annak valószínűsége, hogy az  $\alpha$  fizikai mennyiség az  $x$  tiszta esetben az  $a$  értéket veszi fel, egyenlő  $|x_1|^2 + |x_2|^2 + |x_3|^2$ -nel, vagyis az  $x$  vektor  $\mathfrak{R}(a)$ -ra vetett merőleges vetületének négyzetével. Lényeges megjegyezni, hogy a sajátterekkel együtt az adott  $x$  vektornak azokban bennefekvő vetületét is egyértelműen meghatá-



rozza az  $A$  alak. Figyelembe véve azon valószínűségeknek az értékét, amelyekkel  $\alpha$  az  $a_i$  értékeket felveszi, látjuk, hogy magának az  $A(x)$  hermitikus alaknak az értéke az  $\alpha$  mennyiség középértéke az  $x$  tiszta állapotban.

Minthogy az  $x$  tiszta esetre vonatkozó kijelentéseink számszerűen mind változatlanok maradnak, ha  $x$ -et  $ex$ -szel helyettesítjük, ezek között nem szabad különbséget tennünk. *A tiszta esetnek tehát voltaképpen nem a vektor felel meg, hanem a sugár*; operációinkat nem a vektor-, hanem a sugártestben kell végeznünk. E körülmény alapvető jelentősége majd csak a második részben fog kibontakozni.

Világos, hogy az hermitikus alakok összeadhatók és valós számokkal szorozhatók anélkül, hogy ez kivezetne az hermitikus alakok halmazából. A számolási szabályokkal szemben a 2. § végén támasztott követelmények teljesülnek.

Ha azok az értékek, amelyeket az  $\alpha$  fizikai mennyiség felvehet, igen sűrűn fekszenek, vagy éppen folytonos értékkészletet képeznek, nem valamely meghatározott értékhez tartozó valószínűség iránt fogunk érdeklődni, hanem annak valószínűségét fogjuk tudakolni, hogy  $\alpha$  értéke valamely  $a \leq \alpha \leq a'$  közebe essék. A fentiek alapján főtengeleyrendszerünkben azokat az  $e_i$  egységvektorokat kell megkeresnünk, amelyekhez tartozó  $a_i$  sajátértékek a mondott intervallumba esnek; ezek feszítik ki az  $\mathfrak{R}_a^{a'}$  alteret. A keresett valószínűséget az ezen  $i$  indexre kiterjeszkedő

$$\sum_i x_i \bar{x}_i \quad (a \leq \alpha \leq a') \quad (11)$$

összeg adja meg; ez a tiszta esetet reprezentáló  $x$  vektor  $\mathfrak{R}_a^{a'}$ -re vetett merőleges vetületének négyzete. A (11) kifejezés a Neumann idézett művében bevezetett  $E_a^{a'}$  „egységforma”.

Ha több  $\alpha, \beta, \dots$  mennyiséggel van dolgunk, melyeknek hermitikus alakjaihoz *felcserélhető* koeficiens-mátrixok tartoznak, úgy ezek alkalmas  $e_i$  normális koordinátarendszer bevezetésével szimultán főtengeleyekre transzformálhatók. Az  $e_i$ -knek megfelelő sajátértékeket az  $a_i, b_i, \dots$  szimbólumokkal jelöljük;  $x = e_i$  tiszta esetet reprezentál, melyben a szemügyre vett mennyiségek mindegyike bizonyossággal meghatározott értéket vesz fel, nevezetesen  $\alpha$  az  $a_i$  értéket,  $\beta$  a  $b_i$  értéket stb. A klaszikus fizika feltételezi, hogy *minden* mennyiségre vonatkozóan ez a helyzet s tiszta esetként csak azokat a különlegesen kitüntetett  $e_1, e_2, \dots, e_n$  tiszta eseteket engedi meg, amelyekben minden mennyiség meghatározott értékkel rendelkezik, és minden mást ilyen tiszta esetek keverékének tekint. Mihelyt azonban fellép két olyan fizikai mennyiség, amelyeknek mátrixai nem felcserélhetők, ez a lehetőség elesik: Adott tiszta esetben, melyben az egyik mennyiség biztonsággal megadható értéket vesz fel, a második mennyiségre vonatkozóan csak valószínűségek adódnak. Ez összhangban van Heisenberg nézeteivel, melyeket nemrég fejtett ki e folyóirat hasábjain (ZS. f. Phys. **43**, 172, 1927; magyar fordítása: Magy. Fiz. Foly. **15**, 87, 1967).

*Az elektron példájában*  $n=2$ , mivel minden mennyiség két értéket vehet fel. Alkalmas  $e_1, e_2$  normál koordinátarendszer választása mellett a  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  mennyiségeknek megfelelő mátrixok a következő alakúak:<sup>7</sup>

$$S_x = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad S_y = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad S_z = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}; \quad (12)$$

<sup>7</sup> W. Pauli jr., Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons, ZS. f. Phys. **43**, 601, 1927; P. Jordan, uo. **44**, 21, 1927.



az ezekhez tartozó hermitikus formák pedig

$$x_1 \bar{x}_1 - x_2 \bar{x}_2, \quad x_1 \bar{x}_2 + x_2 \bar{x}_1, \quad i(x_1 \bar{x}_2 - x_2 \bar{x}_1).$$

Ezen mátrixok mindegyikének, s az  $a, b, c$  iránykoszinuszokkal ( $a^2 + b^2 + c^2 = 1$ ) jellemzett irányhoz tartozó

$$S_r = aS_x + bS_y + cS_z = \begin{vmatrix} a & b+ic \\ b-ic & -a \end{vmatrix} \quad (13)$$

mátrixnak is,  $\pm 1$  a sajátértékei. A tiszta esetet, melyben  $\sigma_x$  értéke bizonyossággal  $+1$ , az  $e_1$  vektor adja meg. Az  $x = (x_1, x_2)$  tiszta esetben  $\sigma_x = \pm 1$  valószínűségének értéke  $|x_1|^2$  ill.  $|x_2|^2$ . Keressük meg azt az  $r$  iránynak megfelelő vektort, amelyhez  $\sigma_r$ -nek  $+1$  értéke tartozik bizonyossággal; vagyis: azt az  $(x_1, x_2)$  vektort, amely  $S_r$ -nek a  $+1$  sajátértékhez tartozó főtengele irányába mutat:

$$ax_1 + (b+ic)x_2 = x_1,$$

$$(b-ic)x_1 - ax_2 = x_2.$$

Innen kapjuk:

$$x_1 : x_2 = b+ic : 1-a = 1+a : b-ic.$$

Itt  $a$  az  $r$ -irány és az  $x$ -irány által közbezárt  $\vartheta$  szög koszinusza. Fennáll:

$$\begin{aligned} |x_1|^2 : |x_2|^2 &= b^2 + c^2 : (1-a)^2 = 1 - a^2 : (1-a)^2, \\ &= 1 + a : 1 - a = \cos^2 \frac{\vartheta}{2} : \sin^2 \frac{\vartheta}{2}. \end{aligned}$$

4. § *Keverékek statisztikája.* Az adott keverékben az  $x$  tiszta eset legyen  $v_x$  relatív erősséggel képviselve:  $\sum v_x = 1$ ; ekkor az ezen keverékre vonatkozó  $W$  valószínűségek nyilvánvalóan összegezéssel nyerhetők az egyes  $x$  tiszta esetekhez tartozó  $W(x)$  valószínűségekből, a következő alakban:

$$W = \sum_x v_x W(x).$$

Ebben nincs semmilyen új feltevés. Ha a keverék a tiszta esetek kontinuumát foglalja magában, az összegek helyébe integrálok lépnek.

Ha azt tudjuk csak, mely  $x$  tiszta állapotok vannak valamely sokaságban képviselve — ezek a sugártest valamely  $\mathcal{G}$  tartományát töltik ki —, akkor a statisztika alapjául azt a feltevést vesszük, hogy  $\mathcal{G}$ -n belül valamennyi  $x$  egyenjogú. Ez a feltevés lehetséges, és értelme világos, mivel az  $x$ -térben mint metrikus térben természetes térfogatmérték van értelmezve. Ilyen keverékek jönnek létre pl. perturbációk — a hőmozgás és a részecskék ütközéseinek — eredményeképpen; a valószínűségi megállapítások ezekre vonatkoznak. Mindenekelőtt az egész sugártestre való középértékképzés az

$$\langle x_i \bar{x}_i \rangle = \frac{1}{n}, \quad \langle x_i \bar{x}_k \rangle = 0 \quad (i \neq k)$$

eredményt adja. A  $\langle \rangle$  zárójel a középtértéket jelöli. Eszerint az (5) alak által



reprezentált  $\alpha$  mennyiség középértéke, ha a fellépő tiszta esetekről semmit sem tudunk,

$$= \frac{1}{n} (a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}).$$

Egyébként kitűnik, hogy a főátló elemeinek összege, az hermitikus alak átlósszöge (spurja) az unitér transzformációkkal szemben invariáns.

További probléma ebből a fajtából a következő: legyen  $\alpha$  és  $\beta$  két mennyiség, melyeket  $A$ , ill.  $B$  reprezentál. Bevezetem az  $A$  és  $B$  sajátvektoraiból, az  $\mathbf{e}_i$ -kből, ill. az  $\mathbf{e}_i^*$ -okból álló normális koordinátarendszereket:

$$A(\mathbf{x}) = \sum_i a_i x_i \bar{x}_i, \quad B(\mathbf{x}) = \sum_i b_i x_i^* \bar{x}_i^* \quad (\mathbf{x} = \sum x_i \mathbf{e}_i = \sum x_i^* \mathbf{e}_i^*),$$

valamint az unitér transzformációt, mely közöttük kapcsolatot teremt:

$$x_k^* = \sum_i t_{ik} x_i.$$

Tegyük fel, hogy tudjuk: az  $\alpha$  mennyiség bizonyosan az  $a \leq \alpha \leq a'$  határok között fekszik; ismerni kívánjuk annak  $W$  valószínűségét, hogy a  $\beta$  mennyiség a  $b \leq \beta \leq b'$  határok közé esik. Az  $A$  alak sajátértékei közül  $a_1, a_2, \dots, a_q$  fekszenek az  $a, a'$  között,  $b_1, b_2, \dots, b_\sigma$  pedig jelölje a  $B$  alak azon sajátértékeit, amelyek  $b$  és  $b'$  közé esnek. Azáltal, hogy tudjuk:  $\alpha$  bizonyossággal  $a$  és  $a'$  között fekszik, ki van zárva, hogy  $\alpha$  az  $a_1, a_2, \dots, a_q$  értékektől különböző értéket vesz fel. Az ezzel összeférő tiszta esetekre  $x_{q+1} = \dots = x_n = 0$  azok a  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_q$  vektorok által kifeszített  $\mathfrak{R}_a^{a'}$  altérhez tartoznak. Valamely tetszőleges  $x$  vektor ezen altérre vetett vetületének négyzetét az

$$E_a^{a'} = \sum_{i=1}^q x_i \bar{x}_i = \sum_{i,k=1}^n e_{ik} x_i \bar{x}_k \quad (14)$$

egységforma adja meg. Másrésztől annak valószínűségét, hogy a  $\beta$  mennyiség az  $x$  tiszta esetben a  $b_1, b_2, \dots, b_\sigma$  értékeket veszi fel, az

$$F_b^{b'} = \sum_{i=1}^\sigma x_i^* \bar{x}_i^* = \sum_{i,k=1}^n f_{ik} x_i \bar{x}_k; \quad f_{ik} = \sum_{s=1}^\sigma t_{is} \bar{t}_{ks}$$

egységforma szolgáltatja. A fentiek szerint  $F_b^{b'}$ -ban az  $x_i$  változók közül az első  $q$  számún kívül az összes többi zérussal kell egyenlővé tennünk és azután az  $\mathfrak{R}_a^{a'}$  altérre vonatkozóan középértéket kell képeznünk. Fennáll:

$$\langle x_i \bar{x}_k \rangle = \begin{cases} 1/q & (\text{ha } i=k \leq q) \\ 0 & (\text{az összes többi } i, k \text{ párra}) \end{cases}$$

vagy

$$\langle x_i \bar{x}_k \rangle = \frac{1}{q} e_{ki} \quad (i, k = 1, 2, \dots, n).$$

Ily módon kapjuk:

$$W = \frac{1}{q} \sum_{r=1}^q f_{rr} = \frac{1}{q} \sum_{i,k=1}^n f_{ik} e_{ki} = \frac{1}{q} \sum_{r=1}^q \sum_{s=1}^\sigma |t_{rs}|^2.$$



Ha az  $aa'$  közt rögzítjük és csak a *relatív* valószínűségeket kívánjuk összehasonlítani, melyek különböző  $bb'$  közöknek felelnek meg, úgy az  $1/q$  állandó tényezőt elhagyhatjuk. A jobb oldalon álló összeg  $E_a^{a'} F_b^{b'}$ -nek a spurja (átlóösszege). Minthogy minden egyes hermitikus alakhoz unitér-invariáns módon hozzátartozik az alak koefficiens-mátrixával jellemzett leképezés, a spurképzés mellett az hermitikus alakok mátrixának szorzása is invariáns értelemmel bír. Ennek folytán elég, ha az  $E_a^{a'}, F_b^{b'}$  egységformákat *valamely adott* normál koordináta-rendszerben ismerjük; azokból a keresett relatív valószínűségeket a

$$W = \text{Spur} (E_a^{a'} \cdot F_b^{b'})$$

képlet segítségével megkaphatjuk. Neumann idézett művében a keverékekre vonatkozóan egyedül ezzel a fajta kérdéssel foglalkozik. Végeredménye a mienkkel természetesen tartalmilag megegyezik, képlete azonban bonyolultabb a mienknél. Az egész megfontolásban  $\alpha$ -t helyettesíthetjük több mennyiséggel, melyek egyidejűleg megfigyelhetők, amelyeknek hermitikus alakjai tehát — a  $\beta$ -ével együtt — szimultán főtengelekre transzformálhatók.

Csak az ilyen, keverékekre vonatkozó kérdések esetén játszik a statisztika olyan szerepet, amely — mint Laplace mondja — „tudásunkra és tudatlanságunkra vonatkozik”, vagyis olyan perturbációkra, amelyeket nem akarunk részleteikben nyomon követni, habár azt — legalább is elvileg — megtehetnénk. Ezzel szemben a valószínűségnek, amelyről a tiszta esetben beszélünk, teljesen objektív a jelentése, melynek nincs köze perturbációkhoz, és amelyre szigorú természettörvények érvényesek.

## II. rész. Kinematika, mint csoport

5. § *Csoportokról és unitér ábrázolásairól.* Az *unitér leképezésekre* az hermitikus alakok *főtengely-transzformációjáról* szóló tételhez hasonló tétel érvényes: Adott unitér leképezéshez található olyan  $e_i$  normál koordináta-rendszer, amelyben a leképezést az

$$x'_k = e_k x_k \quad (15)$$

egyenletek írják le. Az  $e_k$  *sajátértékek* egységnyi abszolútértékű számok; azok  $\varphi_k$  fázisait ( $e_k = e^{i\varphi_k}$ ) az unitér leképezés *forgási szögeinek* nevezzük. Ami a sajátértékek és sajátvektorok egyértelműen meghatározott voltát, valamint több unitér leképezésnek szimultán normálalakra [lásd (15)] hozását illeti, azokra az hermitikus alakok főtengely-transzformációjára tett megállapításainkkal analóg megjegyzések vonatkoznak.

Az *unitér leképezések csoportjából* kiindulva absztrakció útján jutunk a *csoport-szémához*, miközben a leképezéseket oly elemekké degradáljuk, amelyeknek természete közömbös számunkra, és csak összetevésük jellegére fordítjuk figyelmünket. Az absztrakt csoport tehát az elemeknek olyan rendszere, amelyben két elemből,  $a$ -ból és  $b$ -ből (ebben a sorrendben) „kompozíció” útján a rendszernek egy  $ab$  eleme áll elő oly módon, hogy

1. érvényes az asszociatív törvény:  $(ab)c = a(bc)$ ;
  2. létezik egy „egységelem” (jele: 1), mely az  $1s = s1 = s$  egyenletet a csoport mindegyik s eleme mellett teljesíti; és hogy
  3. minden  $a$  elemhez tartozik egy  $a^{-1}$  inverz, az  $aa^{-1} = a^{-1}a = 1$  tulajdonsággal.
- Az unitér leképezések csoportja ekkor mint az absztrakt csoport realizációja vagy



ábrázolása jelenik meg, mely azáltal jön létre, hogy minden egyes  $s$  csoportelemhez egy-egy  $U(s)$  unitér leképezést rendelünk oly módon, hogy általánosan fennáll:

$$U(s)U(t) = U(st) \quad (16)$$

[innen azonnal következik:  $U(1) = \mathbf{1}$ ]. Minthogy a csoportszkémát az ábrázolásból absztraháltuk, az ábrázolás *hű*, azaz különböző elemeknek különböző  $U$  leképezések felelnek meg, vagy — ami ugyanazt jelenti — az  $U(s)$  leképezés csak akkor  $= \mathbf{1}$ , ha  $s = 1$ . Az unitér leképezések csoportja *reducibilis*, ha az  $\mathfrak{R}_n$  vektortérben, melyben az unitér leképezések lejátszódnak, létezik egy  $\mathfrak{R}_m$  lineáris altér, melynek dimenziószáma  $m > 0$ , azonban  $< n$ , amely minden  $U(s)$ -sel szemben invariáns. A vektorok, melyek minden  $\mathfrak{R}_m$ -ben fekvő vektorra merőlegesen állnak, egy  $\mathfrak{R}_{n-m}$  lineáris alteret képeznek;  $\mathfrak{R}_n = \mathfrak{R}_m + \mathfrak{R}_{n-m}$  abban az értelemben, hogy minden vektor egy- és csak egyféleképpen bontható fel két komponensre, amelyek egyike  $\mathfrak{R}_m$ -ben, másika pedig  $\mathfrak{R}_{n-m}$ -ben fekszik. Minthogy az  $U(s)$ -ek unitér transzformációk,  $\mathfrak{R}_m$  mellett  $\mathfrak{R}_{n-m}$  is invariáns velük szemben. Az ábrázolás *felbomlik* egy  $m$ -dimenziós és egy  $(n-m)$ -dimenziós ábrázolásra. Ha az  $e_i$  normál koordinátarendszert oly módon választjuk, hogy az első  $m$  alapvektor az  $\mathfrak{R}_m$  teret, az utóbbi  $n-m$  alapvektor pedig az  $\mathfrak{R}_{n-m}$  teret feszíti ki, úgy ezt a felbomlást az  $U(s)$  koefficiens-mátrixok alakja közvetlenül kifejezésre juttatja. Eszerint szorítkozhatunk az *irreducibilis ábrázolások* felkutatására. Az irreducibilis ábrázolásokra érvényes a következő fontos tétel: Ha az  $A$  unitér mátrix minden  $U(s)$ -sel felcserélhető:  $AU(s) = U(s)A$ , úgy  $A = \varepsilon \mathbf{1}$  az  $\mathbf{1}$  egységmátrix többszöröse. [Itt még az sem lényeges, hogy az  $U(s)$ -ek csoportot képeznek.]

Elsősorban *véges csoportokra* gondolunk. Minden csoporthoz meghatározott „*csoportalgebra*” tartozik. Egy *csoporthoz* mennyiséget oly módon adunk meg, hogy minden egyes  $s$  csoportelemhez hozzárendelünk egy-egy  $\xi(s)$  számot. A csoportmennyiségeknek eszerint annyi szám-komponensük van, ahány eleme van a csoportnak; azok tehát — mondhatni — vektorok a csoporttérben, amelyben mindegyik elem egy-egy dimenziót, egy-egy alapvektort jelent.<sup>8</sup> A  $\xi(s)$  komponensekkel rendelkező  $\xi$  mennyiség, mely eszerint szimbolikusan  $\Sigma \xi(s) \cdot s$ -sel jelölhető, az  $s$  elemeknek az  $U(s)$  unitér leképezésekkel megvalósított realizációjában mint az

$$X = \sum_s \xi(s) U(s) \quad (17)$$

mátrix jelenik meg. Képezzük két ilyen  $X, Y$  mátrix szorzatát, melyek a  $\xi$ , ill.  $\eta$  mennyiségekhez tartoznak; ily módon újból egy mátrix áll elő, melyet  $Z$ -vel jelölünk és amely a  $\xi$  és  $\eta$  meghatározta  $\xi$  mennyiséghez tartozik:

$$\begin{aligned} Z = XY &= \sum_{t,t'} U(t)U(t')\xi(t)\eta(t') = \sum U(t')\xi(t)\eta(t') \\ &= \sum_s U(s)\zeta(s), \quad \zeta(s) = \sum_{t'=s} \xi(t)\eta(t'). \end{aligned} \quad (18)$$

Az összegezés (18)-ban mindazon  $t, t'$  elempárookra kiterjed, amelyek „kompozíciója”

<sup>8</sup> A matematikai irodalomban szokásos „csoportszám” elnevezést kerülöm, mert a „szám” elnevezést a közönséges számok számára szeretném fenntartani.



a  $tt'=s$  eredményt adja. Írhatjuk (18)-at valamennyi  $t$  csoportelemre kiterjedő egyszeres összeg alakjában is, habár ez az írásmód kevésbé szimmetrikus:

$$\zeta(s) = \sum_t \xi(st^{-1})\eta(t) = \sum_t \xi(t)\eta(t^{-1}s).$$

A (18) egyenlet tehát a mennyiségek szorzási törvénye a csoportalgebrában. A mennyiségek eszerint, pontos analógiában a megfelelő mátrixokkal, összeadhatók, számokkal szorozhatók, és egymással szorozhatók, oly módon, hogy a legegyszerűbb algebrai axiómák teljesülnek. (Csak a szorzás kommutatív törvénye, és a null-osztókat kizáró axióma nem érvényes.)

A  $\xi$  mennyiséget valósnak nevezzük, ha komponensei a

$$\xi(s^{-1}) = \bar{\xi}(s) \quad (19)$$

egyenletnek tesznek eleget. A megfelelő  $X$  mátrix ekkor hermitikus. Az

$$U(s)U(s^{-1}) = \mathbf{1} \quad \text{és} \quad \bar{U}^*(s)U(s) = \mathbf{1}$$

egyenletekből ugyanis  $\bar{U}^*(s) = U(s^{-1})$  következik; ha tehát (19) fennáll, kapjuk:

$$\bar{X}^* = \sum_s \bar{\xi}(s)\bar{U}^*(s) = \sum_s \xi(s^{-1})U(s^{-1}) = \sum_s \xi(s)U(s) = X.$$

A valós mennyiségek köréből az összeadás, a mennyiségek egymással való szorzása és szorzásuk valós számmal nem vezet ki.<sup>9</sup>

A mi számunkra kiváltképpen *Abel-csoportok* jönnek tekintetbe, melyekben az elemek kompozíciója kommutatív:  $st=ts$ . Valamely véges Abel-csoportnak van egy  $a_1, a_2, \dots, a_f$  bázisa. A bázist  $f$  számú csoportelem képezi. Tulajdonságai a következők: Ha ezen elemek rendjét rendre  $h_1, h_2, \dots, h_f$  jelöli, valamennyi csoportelem megkapható az

$$s = a_1^{z_1} a_2^{z_2} \dots a_f^{z_f} \quad (20)$$

alakban, ahol  $z_i$  egy teljes mod  $h_i$  maradékosztályt fut be, pl. az  $1, 2, \dots, h_i$  számokat. (Az  $a$  elem  $h$  rendje a legkisebb kitevő, amelyre  $a^h$  egyenlő az egységelemmel.) A báziselemek kiválasztását a következőképpen szabályozhatjuk:  $h_2$  legyen  $h_1$  osztója,  $h_3$  legyen  $h_2$  osztója, ...,  $h_f$  legyen  $h_{f-1}$  osztója. Ilyen körülmények között a báziselemek számát és rendjeik ( $h_1, h_2, \dots, h_f$ ) sorozatát — melyben  $h_{i+1}$  osztója  $h_i$ -nek — a csoport egyértelműen meghatározza. Az osztóknak ez a sorozata megfordítva maradéktalanul jellemzi a csoport szerkezetét.

Valamely *Abel-csoport irreducibilis ábrázolásai* igen egyszerűen felkutathatók. Minthogy ugyanis ebben az esetben az  $U(s)$  unitér mátrixok felcserélhetők, azokat egy fent említett tétel szerint mind egyidejűleg „főtengelyekre transzformálhatjuk”; az ábrázolás tehát csupa egydimenziós ábrázolásra bomlik fel, és minden irreducibilis ábrázolás egydimenziós:

$$x' = \varepsilon(s) \cdot x.$$

<sup>9</sup> A természetes és fontos szerepről, amelyet ezek a fogalmak az ábrázoláselméletben játszanak, s amelyek a következőkben is alapvetőeknek fognak bizonyulni a kvantummechanikában, csak az ábrázoláselmélet tanulmányozása alapján nyerhetünk képet. Különösen a következő dolgozatra utalunk: F. Peter és H. Weyl, Math. Ann. 97, 737, 1927.



Itt az  $\varepsilon(s)$  szám függése az  $s$  csoportelemtől a következőképpen írható le: Az  $a_i$  báziselemnek egy  $h_i$ -edik  $\varepsilon_i$  egységgyök felel meg, a (20) csoportelemnek pedig

$$\varepsilon(s) = \varepsilon_1^{s_1} \varepsilon_2^{s_2} \dots \varepsilon_f^{s_f}$$

(Abel-csoportok karaktereinek képlete).

Az ábrázolások problémája azonban a mi számunkra némileg más alakban vetődik fel, mint ahogy azt az eddigiekben megbeszéltük. A kvantummechanikában ugyanis nem a vektoroknak van jelentőségük, hanem pusztán csak a sugaraknak; ezek jellemzik a különböző tiszta eseteket. A következőkben tehát a *homogén nézőpontot* foglaljuk el; eszerint az  $U$  unitér mátrix nem a vektor-, hanem a sugártest leképezését jelenti s ennek megfelelően az  $\varepsilon U$  leképezéssel egybeesik. Így fogjuk a jövőben az ábrázolás szót érteni: mint *hű ábrázolást a sugártest elforgatásai által*.<sup>10</sup> Jellemző követelményünk immár a következőképpen hangzik:

$$U(s)U(t) \simeq U(st). \quad (21)$$

Az egyes  $U(s)$  mátrixokban szereplő önkényes  $\varepsilon$  tényezőket belátásunk szerint rögzíthetjük (a „mérték” választása). A (21) egyenlet ekkor így írható:

$$U(s)U(t) = \delta(s, t) U(st),$$

ahol  $\delta$  az  $s$  és  $t$  csoportelemektől függő egységnyi abszolútértékű szám. A csoport-algebra valamely  $\xi$  mennyisége függni fog a használt mértéktől; ha a mértéket az  $U(s) \rightarrow \varepsilon(s)U(s)$  képletnek megfelelően megváltoztatjuk, úgy minden  $\xi$  mennyiség  $\xi(s)$  komponensei  $\varepsilon^{-1}(s)\xi(s)$ -sel helyettesítendőek. A szorzási törvény így hangzik:

$$\xi(s) = \sum_{t'=s} \delta(t, t') \xi(t) \eta(t').$$

A valós  $\xi$  mennyiségek (19) alatt megadott jellemzése csak akkor helytálló, ha a mértékválasztás úgy történt, hogy  $U(s^{-1}) = U^{-1}(s)$ . Irreducibilis ábrázolásokra most is, mint korábban, érvényes a következő tétel: Ha az  $A$  rögzített elforgatás valamennyi  $U(s)$ -sel felcserélhető:  $A^{-1}U(s)A = U(s)$ , akkor  $A \simeq \mathbf{1}$ .

Az egydimenziós ábrázolások most minden érdekességüket elveszítik, ugyanis az egyetlen egydimenziós ábrázolás az azonosság. De ahogy az ábrázolás szót most értjük, *Abel-csoportok esetében is léteznek többdimenziós irreducibilis ábrázolások*. Nem akkor természetesen, ha az Abel-csoport *ciklikus*, azaz ha egyetlen  $a$  elem ismétléseiből áll:

$$1, a, a^2, \dots, a^{h-1} \quad (a^h = 1).$$

Ha ugyanis az ábrázolás  $a$ -nak megfelelő mátrixa  $A$ , úgy  $A^h = \varepsilon \mathbf{1}$ . Osszuk el  $A$ -t a  $\sqrt[h]{\varepsilon}$  numerikus faktorról; így olyan mértéket kapunk, amelyben  $A^h = \mathbf{1}$ . Ekkor azonban  $A$  hatványai a régi, inhomogén értelemben vett ábrázolását képezik a ciklikus csoportnak. A mondottakat ezért a legegyszerűbb nem-ciklikus Abel-csoporttal

<sup>10</sup> Mélyreható vizsgálatokat végzett ilyen értelemben az ábrázolás problémájára vonatkozóan I. Schur, Crelles Journ. **127**, 20, 1904 és **132**, 85, 1907.



illusztráljuk. Ez a *négycsoport*. Négy elemből áll:  $1, a, b, c$ , és a következő össze-  
tevési szabályok írják le:

$$a^2 = b^2 = c^2 = 1,$$

$$bc = cb = a, \quad ca = ac = b, \quad ab = ba = c.$$

Ezzel izomorf az alábbi  $\mathfrak{B}$  irreducibilis forgáscsoport:

$$U(1) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad U(a) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad U(b) = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix},$$

$$U(c) = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}. \quad (22)$$

A mérték választása oly módon történt, hogy  $U^2(a)$  vagy  $U(a)U(a^{-1}) = 1$ ; a többi  
elemre is ennek megfelelő összefüggések érvényesek. A „valós”

$$\varrho 1 + \xi a + \eta b + \zeta c \quad (23)$$

mennyiségek eszerint azok, amelyeknek  $\varrho, \xi, \eta, \zeta$  komponensei valós számok. Ezek  
algebrája képezi a legegyszerűbb nem-kommutatív algebrát, ami csak létezik: a  
*kvaterniók* algebráját (pontosabban azon kvaterniókét, amelyeknek skaláris kom-  
ponense valós, három vektoriális komponense pedig tisztán imaginárius). A  $\mathfrak{B}$   
ábrázolásban a (23) mennyiséget az

$$X = \begin{vmatrix} \varrho + \xi & \eta + i\zeta \\ \eta - i\zeta & \varrho - \xi \end{vmatrix}$$

mátrix jeleníti meg. Az irreducibilitás minden további nélkül kitűnik abból, hogy  
e mátrix négy eleme között, ha változóknak a  $\varrho, \xi, \eta, \zeta$  mennyiségeket tekintjük,  
nem áll fenn homogén lineáris összefüggés konstans numerikus együtthatókkal.  
Ezt a példát már a mágneses elektronnal kapcsolatban megismertük. Általánosságban  
látni fogjuk, hogy a fizikai rendszer kinematikájának alapját a tiszta esetek sugár-  
testében ható irreducibilis Abel-féle forgáscsoport képezi; ezen csoportalgebra  
valós mennyiségei a rendszerre jellemző fizikai mennyiségek.

Egy Abel-féle forgáscsoporton belül két forgás  $A, B$  mátrixaira (bármilyen  
mérték mellett) egy

$$AB = \varepsilon BA \quad (24)$$

alakú egyenlet áll fenn. Fontoljuk meg, hogy ez miképpen teljesülhet. Képezzük  
mindkét oldal determinánsát; ily módon kapjuk:  $\varepsilon^n = 1$ . Eszerint  $\varepsilon$  egy  $n$ -edik egység-  
gyök. Indukcióval kapjuk továbbá  $k = 1, 2, 3, \dots$  esetére:

$$\left. \begin{aligned} A^k B &= \varepsilon^k B A^k, \\ AB^l &= \varepsilon^l B^l A \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Kombináljuk ezt a két egyenletet oly módon, hogy a másodikat  $A$  és  $B$  helyett  
 $A^k$ -ra és  $B$ -re alkalmazzuk; ily módon kapjuk az általános szabályt:

$$A^k B^l = \varepsilon^{kl} B^l A^k. \quad (26)$$



Feljegyezzük továbbá az

$$(AB)^k = \varepsilon^{\frac{k(k+1)}{2}} B^k A^k \quad (27)$$

egyenletet. Ezt  $k$ -ról  $k+1$ -re következtetve láthatjuk be, felhasználva a (25) képletek közül az elsőt. Ha (25)-ben speciálisan  $k=n$ , kapjuk:  $A^n B = B A^n$ . Ha az Abel-féle forgáscsoport *irreducibilis*,  $A^n$ -nek valamennyi  $B$  csoportelemmel való felcserélhetőségéből következik:  $A^n \approx \mathbf{1}$ . *Valamely irreducibilis  $n$ -dimenziós Abel-féle forgáscsoport valamennyi elemének rendje eszerint osztója  $n$ -nek.*

Ha egy véges Abel-féle csoport *in abstracto* van megadva,  $n$ -dimenziós hű ábrázolásainak felkutatására a következőképpen fogunk eljárni. Az  $U(a) = A$  mátrix mértékét mindegyik báziselemre — pl.  $a_1 = a$ -ra, melynek  $h_1 = h$  a rendje —, oly módon választjuk, hogy  $A^h = \mathbf{1}$ . Miután ez megtörtént, a (20) elemhez tartozó  $U(s)$  mértékét

$$U(s) = A_1^s \cdot A_2^s \dots A_f^s$$

megkövetelésével rögzítjük. Itt lényeges az

$$A_i A_k = \varepsilon_{ik} A_k A_i \quad (i > k; \quad i, k = 1, 2, \dots, f) \quad (28)$$

egyenletekben szereplő  $\varepsilon_{ik}$  kommutátorszámok meghatározása. Minthogy (28)-ból

$$A_i^{h_i} A_k = \varepsilon_{ik}^{h_i} A_k A_i^{h_i},$$

azaz

$$A_k = \varepsilon_{ik}^{h_i} A_i$$

következik,  $\varepsilon_{ik}$ -nak  $h_i$ -edik egységgyököknek kell lennie.

6. § *Általánosítás folytonos csoportokra. Infinitesimális unitér leképezésnek* az olyan unitér leképezést nevezzük, amely az azonosságtól végtelen kicsit tér el, amely tehát minden  $\mathbf{x} = (x_i)$  vektort csupán végtelen kicsiny  $d\mathbf{x} = (dx_i)$  értékekkel változtat meg. Az analóg fogalom a háromdimenziós tér valós ortogonális transzformációira vonatkozóan a merev test kinematikájából ismert: a pörgettyű folytonos elforgatása folyamán lépésről lépésre egy-egy infinitesimális elforgatás megy végbe. Másik egyszerű példa: a kamat folytonos tőkésítésének folyamata rögzített kamatláb mellett; ez az  $x$  mennyiséget minden egyes  $dt$  elemi időközben az  $1 + c dt$  tényezővel szorozza meg, tehát  $dx = cx dt$  növekedést eredményez. Az eredmény az, hogy  $t$  idő elteltével  $x$  megnőtt  $e^{ct} \cdot x$ -re. A végtelen kicsiny mennyiségek elkerülése céljából célszerű itt is egy (teljesen fiktív)  $\tau$  időparamétert bevezetni s így az infinitesimális unitér leképezést a

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = \mathbf{x}C, \quad \frac{dx_k}{d\tau} = \sum_i c_{ik} x_i \quad (29)$$

alakba írni. A követelmény, hogy  $\sum x_i \bar{x}_i$  maradjon invariáns, a

$$\sum_k \left( x_k \frac{d\bar{x}_k}{d\tau} + \bar{x}_k \frac{dx_k}{d\tau} \right) = 0 \quad \text{vagy} \quad \sum_{i,k} (c_{ik} + \bar{c}_{ki}) x_i \bar{x}_k = 0$$

egyenlettel fejezhető ki. A bal oldalon álló hermitikus alak azonban csak akkor



tűnhet el azonosan az  $x_i$ -kben, ha valamennyi koefficiense zérus. Ily módon az antiszimetria feltételét kapjuk:

$$\bar{c}_{ki} = -c_{ik}, \quad \bar{C}^* = -C.$$

Legyen  $C = iA$ ; ekkor  $A$  hermitikus mátrix. Eredményünk: Minden  $A$  hermitikus alakhoz unitér-invariáns módon (vö. 1. §) hozzátartozik egy

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = i\mathbf{x}A$$

unitér leképezés. Ily módon azt találjuk, hogy az hermitikus alakok főtengety-transzformációjára vonatkozó tétel az unitér leképezésekre vonatkozó megfelelő tételnek infinitezimális határeset. Azok az infinitezimális leképezések, amelyek minden sugarat változatlanul hagynak, a

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = i\mathbf{x}c$$

alakúak, ahol  $c$  valós numerikus tényező. A homogén nézőpont azt kívánja tehát, hogy itt  $A$  és  $A + c\mathbf{1}$  között ne tegyünk különbséget.

Ha minden egyes  $d\tau$  elemi időközben megismételjük ugyanazt a (29) infinitezimális unitér leképezést, (29)-et integrálva kapjuk:

$$\mathbf{x}(\tau) = \mathbf{x}U(\tau).$$

$U(\tau)$  véges elfordulást ír le, amely a  $\tau$  idő folyamán megy végbe. Természetesen fennáll:

$$U(\tau + \tau') = U(\tau)U(\tau').$$

Az  $U(\tau)$  elfordulások egyparaméteres folytonos csoportot alkotnak; összetevéskor a  $\tau$  időparaméterek összeadódnak. Vö. a kamat folytonos tőkésítésének fent vázolt folyamatával! A (29) egyenlet integrálása ugyanolyan módon végezhető el, mint ebben az igen egyszerű esetben. Bevezetve a  $\infty$ -hez tartó  $m$  egész számot, a  $\tau$  időközt

felbontjuk  $\frac{\tau}{m}$  elemekre. Az  $m$  számú időelem mindegyikében alkalmazzuk  $\mathbf{x}$ -re

az  $\left(\mathbf{1} + \frac{\tau}{m}C\right)$  transzformációt; ily módon kapjuk:

$$U(\tau) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} + \frac{\tau C}{m}\right)^m = e^{\tau C}.$$

A konvergencia éppen olyan könnyen bizonyítható, mint az egydimenziós esetben, amikor  $C$  szám. A hatványsor-előállítás is megkapható:

$$U(\tau) = \mathbf{1} + \frac{\tau}{1!}C + \frac{\tau^2}{2!}C^2 + \dots \quad (30)$$

Egy másik módszer a szukcesszív approximáció; ez nem feltételezi  $C$  függetlenségét



$\tau$ -tól. Nulladik közelítésnek a  $\tau=0$  mellett adott  $\mathbf{x}$ -et választjuk; általában az  $l$ -edik közelítést az  $(l-1)$ -edikből a

$$\frac{d\mathbf{x}_l}{d\tau} = \mathbf{x}_{l-1}C, \quad \mathbf{x}_l(\tau) = \mathbf{x} + \int_0^\tau \mathbf{x}_{l-1}(\tau)C d\tau$$

egyenletek segítségével határozzuk meg. Az  $\mathbf{x}_l(\tau)$  közelítésnek  $l \rightarrow \infty$  mellett a keresett  $\mathbf{x}(\tau)$  határértékhez konvergálnak;  $\mathbf{x}(\tau)$ -ra a következő végtelen sort kapjuk:

$$\mathbf{x} \sum_{l=0}^{\infty} \int \int \dots \int_{(0 \leq \tau_1 \leq \tau_2 \leq \dots \leq \tau_l \leq \tau)} C(\tau_1)C(\tau_2) \dots C(\tau_l) d\tau_1 d\tau_2 \dots d\tau_l. \quad (31)$$

Ha  $C$  független az időtől, ismét a (30) egyenlet adódik.

*Egy közbevetett megjegyzés:* Említettük, hogy fizikában legtöbbször a *végtelen sok változós alakoknak* van szerepük. Az unitér transzformációknak alávetett végtelen sok változós hermitikus alakok elméletét Hilbert és Hellinger dolgozta ki azon feltevés alapján, hogy az alak korlátos, vagyis létezik egy  $M$  konstans, úgyhogy az alak értékei abszolútértékben bármely 1 hosszúságú vektorra  $M$  alatt maradnak.<sup>11</sup> A fizikában előforduló alakok nem tesznek eleget ennek a feltételnek. Az elmélet kiterjesztését, mely megfelel a fizika követelményeinek, az idézett helyen Neumann kilátásba helyezte. Itt az a feladat áll előttünk, hogy ennek hasonmását az unitér leképezésekre elvégezzük. Ezek esetében az elmélet lényegesen kielégítőbb képet mutat, mivel nem kell speciális, a konvergenciát biztosító feltevéseket tennünk, amilyen Hilbert követelménye volt a korlátosságra vonatkozóan. Az unitér leképezés fogalma ugyanis maga után vonja, hogy a mátrixban minden sor és minden oszlop abszolútérték-négyzetösszege konvergál, mégpedig  $=1$ . (Azt, hogy ez matematikailag miként vihető keresztül, más helyütt adjuk meg.) Az integrális nézőpont fogalmi szempontból az infinitezimális szemléletnek mindig felette áll, egyszersmind lehetővé teszi, hogy felismerjük a differenciális fogalomalkotás természetes határait. Ebben a szellemben célszerű — hiszen valamely  $\alpha$  mennyiséggel együtt annak  $k\alpha$  valós állandószorosai is fellépnek mint fizikai mennyiségek — ha ezeket  $e^{ikx}$ -val, a  $kA$  hermitikus mátrixokat az unitér  $e^{ikA}$ -kal helyettesítjük. Azok  $A$ -val együtt főtengelegyre transzformált alakban jelennek meg; az  $a_\mu$  sajátértékek helyett most az  $e^{ika_\mu}$  számok jelennek meg mint sajátértékek.

De térjünk rá most a *végtelen csoportokra*! Egy végtelen csoport lehet diszkontinuus jellegű, mint az  $x, y, z$  tengelyekre vonatkozóan egészszámú komponensekkel jellemzett rácstranzlációk csoportja, mely a kristályszerkezetben lép fel. Előfordulhatnak vegyes folytonos-diszkrét csoportok is, mint pl. a tér mindazon tranzlációinak csoportja, amelyeknek  $x$ -komponense egészszámú. Most azonban különösképpen a folytonos csoportokra irányítjuk tekintetünket. Az ilyen csoportot úgy gondoljuk el, hogy azt — S. Lie szerint — *infinitezimális elemei* generálják. Ha a csoport egy  $f$ -paraméteres folytonos  $\mathfrak{G}$  sokaság, úgy az infinitezimális elemek a csoport sokaságnak azok a pontjai, amelyek az 1-nek megfelelő ponthoz végtelen közel vannak, vagy másként az 1-ből kiinduló vonalelemek. Azok tehát  $f$ -dimenziós *lineáris* sokaságot képeznek. Azonnal az ábrázolást — az absztrakt

<sup>11</sup> D. Hilbert, Grundzüge einer allgemeinen Theorie der Integralgleichungen, Leipzig 1912, különösen a IV. szakasz. E. Hellinger, Crelles Journal 136, 1, 1910.



elemek helyett a konkrét unitér leképezéseket — tekintve, ezzel az antihermitikus mátrixok egy  $f$ -dimenziós serege áll előttünk:

$$g: C_1 d\sigma_1 + C_2 d\sigma_2 + \dots + C_f d\sigma_f, \quad (32)$$

melyben  $C_1, C_2, \dots, C_f$  önkényesen választott bázis és a  $d\sigma_1, d\sigma_2, \dots, d\sigma_f$  numerikus paraméterek minden valós értéket felvehetnek. Legyen (32)-ben  $d\sigma_i = \alpha_i d\tau$  és iteráljuk ezt az infinitezimális leképezést, melyet úgy gondolunk el, hogy az a  $d\tau$  időelem folyamán megy végbe, úgy  $\tau$  idő múltán, ha  $\alpha_i \tau$  helyett most ismét  $\sigma_i$ -t írunk, kapjuk:

$$U(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_f) = e^{\sigma_1 C_1 + \sigma_2 C_2 + \dots + \sigma_f C_f}. \quad (33)$$

A  $g$  infinitezimális csoporton belül a „kompozíció” a megfelelő paraméterek összeadását eredményezi. Úgy tetszhet azért, hogy minden (32) alakú lineáris sereg egy  $f$ -paraméteres folytonos csoportot generál a (33) képlet szerint. Ez azonban nem így van, mint azt a következő gondolatmenet mutatja, mely ismert integrálhatósági megfontolások mintáját követi. Ez a gondolatmenet az infinitezimális elemekre vonatkozóan azt a tényt használja ki, hogy két leképezéssel,  $U$ -val és  $V$ -vel együtt az  $UVU^{-1}V^{-1}$  kommutátort is magában kell foglalnia a csoportnak. Ha tehát  $C$  és  $C'$  két olyan mátrix, mely a seregben fellép, úgy a

$$d\mathbf{x} = \mathbf{x}C d\tau \quad \text{és} \quad d'\mathbf{x} = \mathbf{x}C' d\tau'$$

infinitezimális leképezések mindketten a csoporthoz tartoznak. Végezzük el őket egymást követően, egyszer a  $d, d'$ , másodszor a  $d', d$  sorrendben, úgy az ily módon kapott vektorok különbsége

$$\Delta\mathbf{x} = dd'\mathbf{x} - d'\mathbf{x}d = \mathbf{x}(CC' - C'C) d\tau d\tau'.$$

Ez az infinitezimális leképezés a keresett kommutátor. Így tehát  $C$ -vel és  $C'$ -vel együtt  $CC' - C'C$ -nek is mindenkor hozzá kell tartoznia a  $g$  sereghez. A bázis segítségével megfogalmazva ez azt jelenti, hogy a  $C_i C_k - C_k C_i$  mátrixoknak a  $C_1, C_2, \dots, C_f$  mátrixok valós együtthatójú lineáris kombinációi alakjában kifejezhetőeknek kell lenniök. Ez a feltétel, melyet Lie állított fel, és amelynek levezetése könnyen szigorúvá tehető, nem csak szükséges, hanem elégséges is.<sup>12</sup>

Egy Abel-csoport bármely két elemének kommutátora  $\mathbf{1}$ -gyel egyenlő. Ebben az esetben a  $C_i$  mátrixoknak ki kell elégíteniök a

$$C_i C_k - C_k C_i = 0 \quad (34)$$

egyenleteket, azaz felcserélhetőeknek kell lenniök. Ha az  $A, B$  mátrixok felcserélhetőek, úgy fennáll:

$$e^{A+B} = e^A \cdot e^B,$$

éppúgy, mint a számokra. A (34) egyenlet, vagyis az infinitezimális elemek felcserélhetősége, eszerint elegendő ahhoz — ami voltaképpen magától értetődő —, hogy az egész csoport Abel-féle jellegét biztosítsa; (34) alapján fennáll tehát:

$$U(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_f) U(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_f) = U(\sigma_1 + \tau_1, \sigma_2 + \tau_2, \dots, \sigma_f + \tau_f).$$

<sup>12</sup> Erre vonatkozóan pontosabban lásd pl.: H. Weyl, *Mathematische Analyse des Raumproblems*, Berlin 1923, 33—36. old. és a megfelelő függelékek.



Eszerint minden  $f$ -paraméteres Abel-csoport izomorf valamely  $f$ -dimenziós tér translációinak csoportjával. A  $C_i$ -k szerepe hasonló egy véges Abel-csoport báziséhoz.

Bár Abel-csoporttal lesz dolgunk, mindamellett a leképezéseket mint a sugártest leképezéseit kell felfognunk. Az unitér leképezések között az  $=$  jelet mindenütt  $\simeq$  jellel kell helyettesítenünk. A (34) feltételek helyére most a

$$C_\mu C_\nu - C_\nu C_\mu = ic_{\mu\nu} \mathbf{1}$$

alakú feltételek lépnek;  $C_{\mu\nu}$  valós számokból álló antiszimmetrikus szkéma. Az

$$A = \sigma_1 C_1 + \dots + \sigma_f C_f \quad \text{és} \quad B = \tau_1 C_1 + \dots + \tau_f C_f$$

mátrixokkal leírt infinitezimális leképezések kommutátora

$$AB - BA = i \sum_{\mu, \nu} c_{\mu\nu} \sigma_\mu \tau_\nu \mathbf{1}.$$

A

$$\sum_{\mu, \nu} c_{\mu\nu} \sigma_\mu \tau_\nu = h(\sigma, \tau)$$

antiszimmetrikus alakot, mely a bázistól független jelentéssel rendelkezik, *kommutátorformának* nevezem. Legyen (26) alatt  $k=l=m$  egy végtelenhez tartó szám, és helyettesítsük  $A$ -t és  $B$ -t  $\mathbf{1} + \frac{A}{m}$ -mel, ill.  $\mathbf{1} + \frac{B}{m}$ -mel. Az  $m \rightarrow \infty$  határesetben a csoport két  $U(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_f) = U(\sigma)$  és  $U(\tau)$  elemének kommutátorára kapjuk:

$$U(\sigma)U(\tau)U^{-1}(\sigma)U^{-1}(\tau) = e(h(\sigma, \tau)) \cdot \mathbf{1}. \quad (35)$$

[Itt és a következőkben is gyakran  $e^{ix}$  helyett  $e(x)$ -et írok]. Ugyanezt a helyettesítést (27)-ben elvégezve a határátmenet után kapjuk:

$$U(\sigma + \tau) = e\left(\frac{1}{2}h(\sigma, \tau)\right)U(\tau)U(\sigma) = e\left(-\frac{1}{2}h(\sigma, \tau)\right)U(\sigma)U(\tau).$$

Ha a forgáscsoport *irreducibilis*, valamely rögzített  $U(\sigma)$  csak akkor lehet *valamennyi*  $U(\tau)$ -val felcserélhető, ha  $\simeq 1$ , azaz ha a  $\sigma_i$  paraméterek eltűnnek. Ez azt mutatja, hogy a kommutátorforma nem-elfajult, ui. adott  $\sigma_i$  értékrendszer mellett csak akkor tűnhet el a  $\sigma_i$ -kben azonosan, ha valamennyi  $\sigma_i = 0$ . (Azaz a  $|c_{ik}|$  determináns  $\neq 0$ .) Ilyen forma csak akkor létezik, ha a változók  $f$  száma *páros*, s annak a bázis alkalmas választásával (azáltal, hogy a  $\sigma_i$  és  $\tau_i$  változókat alkalmas lineáris transzformációval kogrediensen transzformáljuk) egyértelmű, számszerűen meghatározott alak adható: A  $\|c_{ik}\|$  koefficiens-mátrix csupa kétszer kettes  $\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix}$  almátrixokra esik szét, melyek a főátló mentén sorakoznak. Most célszerűbb, ha  $f$  helyett  $2f$ -et írunk és az így bevezetett „kanonikus bázis” jelölésére az

$$iP_v, iQ_v \quad (v=1, 2, \dots, f)$$

szimbólumokat használjuk, s az ezekhez tartozó kanonikusan párosított paramétereket pedig  $\sigma_i$ -vel és  $\tau_i$ -vel jelöljük. Az  $i$  tényező bevezetése azért történt, hogy



hermitikus  $P_v, Q_v$  alakokat nyerjünk. Fennállnak a következő felcserélési összefüggések:

$$\begin{aligned} i(P_v Q_v - Q_v P_v) &= 1, \quad i(P_\mu Q_v - Q_v P_\mu) = 0, \quad \text{ha } \mu \neq v \\ \text{és} \\ P_\mu P_v - P_v P_\mu &= 0, \quad Q_\mu Q_v - Q_v Q_\mu = 0 \quad \text{minden } \mu\text{-re, } v\text{-re.} \end{aligned} \quad (36)$$

Az

$$U(\sigma) = e(\sigma_1 P_1 + \sigma_2 P_2 + \dots + \sigma_f P_f)$$

leképezések önmagukban unitér (vektor-) leképezések alkotta  $f$ -paraméteres Abel-csoportot képeznek; ugyanez áll a

$$V(\tau) = e(\tau_1 Q_1 + \tau_2 Q_2 + \dots + \tau_f Q_f)$$

leképezésekre is. Ezzel szemben

$$\begin{aligned} U(\sigma)V(\tau)U^{-1}(\sigma)V^{-1}(\tau) &= e(\sigma_1 \tau_1 + \dots + \sigma_f \tau_f) 1 \\ \text{és} \\ e(\sigma_1 P_1 + \dots + \sigma_f P_f + \tau_1 Q_1 + \dots + \tau_f Q_f) \\ &= e\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^f \sigma_i \tau_i\right) V(\tau)U(\sigma) = e\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^f \sigma_i \tau_i\right) U(\sigma)V(\tau). \end{aligned} \quad (37)$$

7. § *A kanonikus változók helyettesítése a csoporttal. Az elektron.* Fejtegetésünkben eljutottunk arra a pontra, ahol a kapcsolat a kvantummechanikával szembeszökő. Hiszen ha egy  $f$  szabadsági fokú mechanikai rendszerrel van dolgunk, a kanonikus változókat reprezentáló hermitikus mátrixok éppen a (36) összefüggéseknek tesznek eleget, eltekintve a  $\hbar/2\pi$  tényezőtől, melyről még szó lesz, és amelyet egyelőre a mértékegységekbe olvasztunk be. Legyen először a szabadsági fokok száma  $f=1$ , a kanonikus változók jele legyen a szokott módon  $p, q$ , az őket reprezentáló alakoké pedig  $P, Q$ ; ekkor az

$$i(PQ - QP) = 1 \quad (38)$$

összefüggés azt mondja ki, hogy a sugártest  $iP$  és  $iQ$  jellemezte infinitezimális elforgatásai felcserélhetők. Az általuk generált Abel-féle forgáscsoportot az

$$U(\sigma, \tau) = e(P\sigma + Q\tau) \quad (39)$$

elforgatások képezik ( $\sigma, \tau$  valós paraméterek, melyek a leképezések összetevésekor additíve viselkednek). A csoportalgebra valamely mennyisége, melynek  $\xi(\sigma, \tau)$  komponensei a (19) egyenletnek, vagy a

$$\bar{\xi}(\sigma, \tau) = \xi(-\sigma, -\tau) \quad (40)$$

feltételnek tesznek eleget, mint az

$$F = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e(P\sigma + Q\tau) \bar{\xi}(\sigma, \tau) d\sigma d\tau \quad (41)$$

hermitikus alak jelenik meg.

Valamely fizikai mennyiséget matematikailag az  $f(p, q)$  függvény kifejezésének megadásával definiálhatunk, mely azt a  $p, q$  kanonikus változók függvényeként



előállítja. Maradt egy probléma: miként vihető át egy ilyen kifejezés mátrixokra? Ez csupán a  $p^k, q^l$  hatványokra, s így a polinomokra világos minden további nélkül. Természetesen már itt fellépett a nehézség, hogy nem tudtuk: pl. a  $p^2q$  kifejezést a  $P^2Q$ , a  $QP^2$  vagy a  $QQP$  alakban értelmezzük-e? A kérdés ilyen feltevése nyilvánvalóan túl formális. Csoportelméleti nézőpontunk nyomában megmutatja a helyes utat: a (41) hermitikus alak az

$$f(p, q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e(p\sigma + q\tau) \xi(\sigma, \tau) d\sigma d\tau \quad (42)$$

menntiséget reprezentálja. A Fourier-féle integráltétel szerint ugyanis minden  $f(p, q)$  függvény egyértelműen kifejezhető ebben az alakban, és ha  $f$  a  $p, q$  valós változók valós értékű függvénye, úgy  $\xi(\sigma, \tau)$  éppen a (40) feltételnek tesz eleget. A (42) integrálegelőállítás nem mindig értendő szó szerint; a lényeges csak az, hogy a jobb oldalon az  $e(p\sigma + q\tau)$  kifejezések egy lineáris kombinációja áll, amelyekben  $\sigma$  és  $\tau$  tetszőleges valós értékeket felvehetnek. Ha pl.  $q$  ciklikus koordináta, mely mod  $2\pi$  értendő, úgyhogy minden tekintetbe jövő függvény  $q$ -ban  $2\pi$  szerint periodikus, úgy az integrálás  $\tau$ -ra összegezéssel helyettesítendő, mely a  $\tau$  egész számokra terjed ki; ez esetben vegyes folytonos-diszkrét csoporttal van dolgunk. A megszorítások, melyeknek  $f(p, q)$ -t alá kell vetnünk, hogy a (42) alakban kifejezhető legyen, még aggályokat ébreszthetnek. Tudjuk azonban, hogy voltaképpen  $e(kf(p, q))$  az ily módon kifejtendő függvény (ahol  $k$  valamilyen valós állandó), s ebben a megfogalmazásban a feladat N. Wiener, Bochner és Hardy újabb vizsgálatai szerint meggyőző módon, egyértelműen elintézhető.<sup>13</sup>

Az általánosítás  $f$  szabadsági fokra kézenfekvő. Speciálisan láttuk, miként adódik ki az irreducibilitás követelményéből a folytonos csoportok esetében a jellegzetes kanonikus párosítás. Véges csoportok esetében természetesen nem létezik ennyire egységes szkéma. Ez a fizikai tényekkel összhangban van. P. Jordan<sup>14</sup> fejtegetéseiből már kitűnt, hogy a mágneses elektron esetében mind  $\sigma_y$ , mind  $\sigma_z$  tekinthető  $\sigma_x$  „kanonikus konjugált”-jának. Legfeljebb kanonikusan konjugált mennyiség-hármasról beszélhetnénk itt értelmes módon, nem pedig mennyiség-párról. Győződjünk meg arról, hogy éppen e diszkrét esetben is, mely a folytonos esettel a leginkább ellentétben áll, megfogalmazásunk pontosan a helyes eredményt szolgáltatja! Az — még egyszer összefoglalva — a következőképpen hangzik: *Valamely fizikai rendszer kinematikai jellege egy irreducibilis Abel-féle forgáscsoportban nyer kifejezést, amelynek szubsztrátuma a „tisztá esetek” által képezett sugártest. Ezen csoport-algebra valós mennyiségei a fizikai mennyiségek; az hermitikus mátrixok, melyeknek alakjában ezek az absztrakt csoport elforgatásokkal való ábrázolása folyományaképpen megjelennek, a fizikai mennyiségek reprezentánsai (ezek jelentőségét az I. részben fejtettük ki).*

A korábban leírt  $\mathfrak{B}$  kétdimenziós forgáscsoport, mely a négyescsoporttal izomorf, mint azt a 2. § (12) képletével való összehasonlítás mutatja, a mágneses elektron

<sup>13</sup> N. Wiener, On representations of functions by trigonometrical integrals, Math. ZS. 24, 575, 1926; S. Bochner és G. H. Hardy, Note on two theorems of N. Wiener, Journ. Lond. Math. Soc. 1, 240, 1926; S. Bochner, Darstellung reell variabler und analytischer Funktionen durch verallgemeinerte Fourier- und Laplaceintegrale, Math. Ann. 97, 635, 1927; vö. ezzel továbbá a majdnem-periodikus függvények H. Bohrtól származó elméletét, pl. H. Weyl, Math. Ann. 97, 338, 1926.

<sup>14</sup> ZS. f. Phys. 44, 21—25, 1927. P. Jordan szerint, Über die Polarisation der Lichtquanten, uo. 292. old., a fénykvantumoknak ugyanilyen a kinematikája.



kinematikáját jellemzi. Minthogy  $n=2$ , minden mennyiség csak két értéket vehet fel. Az egyedül létező fizikai mennyiségek  $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  valós numerikus együttthatókkal képezett lineáris kombinációi. A mágneses elektron azonban nem csupán az elmélet speciális eseteként adódik; *a rá jellemző kinematika az egyetlen lehetséges, ha minden mennyiség csak két értéket vehet fel ( $n=2$ )*. Bizonyítás: Tudjuk, hogy ezen feltevés mellett az egységelemen kívül minden más  $a$  csoportelemnek a rendje 2. A megfelelő  $A$  mátrix két sajátértéke eszerint ellentétben egyenlő. Legyen  $a \neq 1$ ; ekkor az ehhez tartozó  $A$  alkalmas normális koordinátarendszer választása mellett

$$A = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (43)$$

alakú lesz. Csoportunk  $A$ -val felcserélhető  $U$  mátrixainak alakja szükségképpen  $\begin{vmatrix} c & 0 \\ 0 & c' \end{vmatrix}$ ; ha ez nem  $\simeq 1$ , úgy  $c' = -c$ , és  $U \simeq A$ . Vannak olyan csoportelemek, amelyeknek  $B$  mátrixa nem cserélhető fel  $A$ -val. Tudjuk, hogy az

$$AB = \varepsilon BA$$

egyenletben  $\varepsilon$  egy második egységgyök, így tehát  $\varepsilon$ -nak  $-1$ -gyel kell egyenlőnek lennie. Ebből következik, hogy  $B$  ilyen alakú:

$$B = \begin{vmatrix} 0 & b \\ b' & 0 \end{vmatrix}. \quad (44)$$

A  $b, b'$  számok egységnyi abszolútértékűek. Egy határozott ilyen  $B$ -t választunk, melyre  $B^2 = 1, bb' = 1$ . Azonfelül  $b$  eggyé tehető oly módon, hogy az eddigi  $e_1, e_2$  normális koordinátarendszert az  $e_1, be_2$  rendszerrel helyettesítjük; (43)-at ez nem érinti:

$$B = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}. \quad (45)$$

Csoportunk minden olyan  $U$  mátrixa, mely  $A$ -val felcserélhető,  $\simeq 1$  vagy  $A$ . Ha a mátrix nem cserélhető fel  $A$ -val, a (44) alakot mutatja; megszorozva a (45) alatt megadott, meghatározott  $B$ -vel, átlós mátrixot nyerünk. Ez  $A$ -val felcserélhető, tehát  $\simeq 1$  vagy  $A$ . Eredményünk az, hogy minden  $U \simeq$  az  $1, A, B, AB$  mátrixok valamelyikével. *Valóban a négyescsoport és annak  $\mathfrak{B}$  ábrázolása adódott.*

8. § *Áttérés Schrödinger hullámelméletére.* Hasonlóan ahhoz, ahogy az imént az  $n=2$  esetet tárgyaltuk, meg kívánjuk mutatni, hogy valamely kétparaméteres folytonos csoportnak a fenti értelemben csak egy irreducibilis ábrázolása van (az azonos ábrázoláson kívül). A mondott csoportot a két báziselemű véges csoportból határártmenettel kapjuk. Az  $A, B$  bázisú irreducibilis Abel-féle forgáscsoport dimenziója legyen  $n$ . Az

$$AB = \varepsilon BA \quad (46)$$

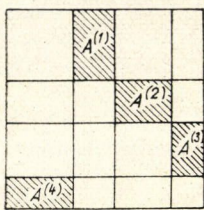
kommutátor-összefüggésben  $\varepsilon$  egy  $n$ -edik egységgyök. Vizsgáljuk meg közelebbről ezt az egyenletet. Az  $\varepsilon$  kommutátorszám legyen egy  $m$ -edik primitív egységgyök, azaz  $\varepsilon^m$  legyen az a legalacsonyabb hatvány, mely  $=1$ ; az  $m$  szám osztója  $n$ -nek.



Az  $A, B$  elforgatásokra fennáll:  $A^n \simeq \mathbf{1}$ ,  $B^n \simeq \mathbf{1}$  s így a mátrixok választhatók oly módon, hogy  $A^n = B^n = \mathbf{1}$  legyen. A normális koordináta-rendszer alkalmas választásával hozzuk  $B$ -t főtengelekre; a főátlóban álló  $b_i$  elemek valamennyien  $n$ -edik egységgyökök. A (46) egyenletből  $A = \|a_{ik}\|$  elemeire kapjuk:

$$\frac{b_k}{b_i} a_{ik} = \varepsilon a_{ik}. \quad (47)$$

Az  $i$  indexeket és a megfelelő  $x_i$  változókat osztályokba soroljuk azon elv alapján, hogy  $i$  és  $k$  egyazon osztályba tartoznak, ha a  $b_i/b_k$  hányados egy  $m$ -edik egységgyökkel,  $\varepsilon$  valamely hatványával egyezik meg. Ez valóban osztályokba való beosztást jelent, mivel  $b_i/b_k$ -val és  $b_k/b_l$ -lel együtt  $b_i/b_l$  is hatványa  $\varepsilon$ -nak. Ha  $i$  és  $k$  különböző osztályokba tartoznak, a (47) egyenlet szerint  $a_{ik} = 0$ ; az  $A$  mátrix eszerint ugyanolyan módon bomlik fel, ahogy az indexeket osztályokba soroltuk. A feltételezett irreducibilitás folytán tehát csak egy osztály lép fel.



1. ábra

Miután ezt felismertük, finomabb beosztásra térünk át: most  $i$  és  $k$  csak akkor tartozzék ugyanabba az osztályba, ha  $b_i = b_k$ . Ezen osztályok egyikét, amelyre  $b_i = b$ , önkényesen kiválasztjuk mint elsőt; másodikként az következézőt, amelyre  $b_i = \varepsilon b$ , a harmadikat  $b_i = \varepsilon^2 b$ , ..., az  $(m+1)$ -ediket  $b_i = \varepsilon^m b$  jellemezze; ez utóbbi megegyezik az elsővel. Gondoljuk el, hogy a változókat is ebben a sorrendben írtuk fel és számoztuk meg. A (47) egyenlet szerint az  $A$  mátrixban mindazok az  $(i, k)$  mezők üresek:  $a_{ik} = 0$ , amelyeknek  $i, k$  sor- és oszlopindexei nem két egymás után következő osztályba tartoznak. Az  $A$  mátrix tehát az 1. ábrán szemléltetett szerkezetű, ahol a be nem vonalkázott részek üresen állnak (egyébként  $m$ -et 4-nek választottuk). A bevonalkázott tartományokban állnak az  $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(m)}$  „almátrixok”. Minthogy  $A$  unitér, az elemek abszolútérték-négyzetének összege minden sorban és minden oszlopban 1. Ennek folytán ugyanez érvényes az egyes almátrixok soraira és oszlopaira is. Az  $A^{(1)}$  almátrixban álló *valamennyi* elem abszolútérték-négyzetének összege egyenlő egyrésztől  $A^{(1)}$  sorainak, másrésztől oszlopainak számával. Az  $A^{(1)}$  téglalap valójában négyzet; a második osztály elemeinek  $d$  száma megegyezik az első osztály elemeinek számával. Minden osztály egyenlő számú elemből áll:  $n = md$ . Ennek megfelelően korrigálandó az ábra. A bevonalkázott almátrixok mindegyike önmagában véve unitér. Ha az első osztályba tartozó változókra alkalmazzuk az  $A^{(1)}$  mátrixszal leírt unitér transzformációt, ez az  $A^{(1)}$  mátrixot a  $d$ -dimenziós egység mátrixszá alakítja át. Ezt a normálalakot nem rontja el, ha ezek után az első osztály változóit, s ugyanúgy a második osztály változóit, mindegyiket önmagában véve, *ugyanazon* tetszőleges unitér transzformációnak vetjük alá. Ezt felhasználhatjuk arra, hogy a második almátrixot is egység mátrixszá alakítsuk át; sít egészen az  $(m-1)$ -ikig. Az ily módon nyert normálalakon nem esik sérelem, ha mindegyik osztály változóit egymás között ugyanolyan unitér transzformációnak vetjük alá. Ezt a transzformációt, mint tudjuk, oly módon határozhatjuk meg, hogy az utolsó  $A^{(m)}$  almátrix is átlós alakot öltjön. Ezek után újra számozzuk a változókat: először minden osztályból kiválasztjuk az első változót, azután minden osztályból a másodikat is. Ekkor az  $A$  mátrix  $d$  számú almátrixra esik szét, melyek a főátló mentén sorakoznak. A feltételezett irreducibilitás folytán csak egy ilyen almátrix



ván:  $d=1, n=m$ . A következő normálalakot kapjuk (a ki nem töltött mezők „üresen” állnak):

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & 0 & 1 & \\ \dots & & & & \dots \\ a & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \varepsilon^r & & & & \\ & \varepsilon^{r+1} & & & \\ & & \varepsilon^{r+2} & & \\ \dots & & & & \dots \\ & & & & \varepsilon^{n+r-1} \end{pmatrix}.$$

A kitevők  $B$ -ben:  $n$  egymást követő szám;  $\varepsilon$  pedig  $n$ -edik primitív egységgyök. Az  $A^n = \mathbf{1}$  egyenletből végül  $a=1$  adódik. A változókat számozzuk  $r$ -rel kezdődően és minden indexet értsünk modulo  $n$ ; ekkor a két leképezés:

$$A: x'_k = x_{k-1}, \quad B: x'_k = \varepsilon^k x_k.$$

Innen nyomban adódnak az ismételt leképezésekre vonatkozó képletek:

$$A^s: x'_k = x_{k-s}, \quad B^t: x'_k = \varepsilon^{kt} x_k. \quad (48)$$

Most teljes szigorúsággal elvégezhető a határátmenet a folytonos csoportra. Legyen (39) a folytonos kétparaméteres irreducibilis Abel-féle forgáscsoport. Az  $iP, iQ$  bázis legyen (38) szerint normálva. Azonosítsuk a megfontolásunkban szereplő  $A$ -t az infinitezimális  $e(\xi P)$ -vel,  $B$ -t  $e(\xi Q)$ -val, ahol  $\xi$  és  $\eta$  valós infinitezimális állandók. Ha  $s\xi = \sigma$  és  $t\eta = \tau$ , akkor  $e(\sigma P) = A^s$ ,  $e(\tau Q) = B^t$  a  $\xi, \eta \rightarrow 0$  határesetben;  $\varepsilon$  megegyezik  $e(\xi\eta)$ -val,  $\varepsilon^{kt} = e(\xi k\tau)$ . Az  $e^{i\tau q}$  fizikai mennyiség reprezentánsa  $e(\tau Q)$ ;  $\varepsilon^{kt}$  tehát tetszőleges valós  $\tau$  mellett az  $e^{i\tau \xi k}$  értékeket veheti fel, ahol  $k$  az egész számokon fut végig. Más szavakkal: a  $q$  mennyiség a  $k\xi$  értéket veheti fel, értékkészlete a valós számok összefüggő kontinuumma  $-\infty$ -től  $+\infty$ -ig. (Itt  $k$  természetesen mod  $n$ ,  $k\xi$  pedig mod  $n\xi$  értendő;  $n\xi$  azonban  $2\pi/\eta$  többszöröse, következésképpen limeszben végtelen nagy.) Ezért most  $k\xi$  helyett  $q$ -t írunk, és  $q$ -n olyan változót értünk, amely a  $q$  fizikai mennyiség értékkészletét futja be;  $x_k$  helyett  $\sqrt{\xi}\psi(q)$ -t írunk. Itt  $\psi(q)$  tetszőleges komplex értékű függvény, mely az

$$\int |\psi(q)|^2 dq = 1 \quad (49)$$

normálási feltételnek tartozik eleget tenni. Értékeit úgy kell felfognunk, mint valamely „tisztá eset”  $q$  különböző értékeinek megfelelő komponenseit abban a normális koordinátarendszerben, amelyet a mennyiség sajátértékei képeznek. — A (48) alatti második egyenlet helyett limeszben kapjuk:

$$\psi' = \psi V_\tau, \quad \psi'(q) = e^{i\tau q} \psi(q); \quad (50)$$

ez a  $V_\tau$  unitér leképezés reprezentálja az  $e^{i\tau q}$  mennyiséget. Ugyanezt a határátmenetet elvégezve az első egyenleten nyerjük a

$$\psi' = \psi U_\sigma, \quad \psi'(q) = \psi(q - \sigma) \quad (51)$$

unitér leképezést, mely  $e^{i\sigma p}$ -t reprezentálja. Mind a két leképezés valóban unitér, mivel a (49) egyenletet változtatlanul hagyják; azok a  $\sigma$ , ill.  $\tau$  paraméterek különböző értékei mellett két egyparaméteres Abel-csoportot képeznek:

$$U_{\sigma+\sigma'} = U_\sigma U_{\sigma'}, \quad V_{\tau+\tau'} = V_\tau V_{\tau'}.$$



$\psi U_\sigma V_\tau$  az  $e^{i\tau q} \psi(q - \sigma)$  függvényre egyenlő, azonban  $\psi V_\tau U_\sigma = e^{i\tau(q - \sigma)} \cdot \psi(q - \sigma)$ , úgy-  
 hogy — amint annak lennie kell — fennáll a

$$\psi U_\sigma V_\tau = e^{i\sigma\tau} \psi V_\tau U_\sigma$$

kommutátoregyenlet. Az  $e(\sigma p + \tau q)$  mennyiségnek (37) szerint a

$$\psi(q) \rightarrow \psi'(q) = e^{-1/2i\sigma\tau} \cdot e^{i\tau q} \psi(q - \sigma)$$

leképezés felel meg.

Ha végül visszatérünk az infinitezimális operációkra — ami természetesen általában nem célszerű —, úgy  $p$  és  $q$  reprezentánsai a következő alakban adódnak:

$$p: \delta\psi = i \frac{d\psi(q)}{dq}, \quad q: \delta\psi = q \cdot \psi(q). \quad (52)$$

Ezzel eljutottunk a Schrödinger-féle megfogalmazáshoz. A Schrödinger-féle hullám-  
 egyenlet  $\psi_n(q)$  sajátfüggvényei eszerint azt az unitér transzformációt adják meg,  
 amely a  $q$  mennyiség és az  $E$  energia két főtengelyrendszere között teremt kapcsolatot.  
 Tekintettel az első részre, innen kiadódnak Pauli feltevései  $\psi$  valószínűségi jelentéséről.

Mindez nehézség nélkül átvihető több szabadsági fokra. *Valamely rendszer kinematikáját, amelyet folytonos csoport fejez ki, a szabadsági fokok  $f$  száma egyértelműen meghatározza.* Targyalásunk érvényes arra az esetre is, amikor a  $q$  mennyiség ciklikus koordináta, mely csupán mod  $2\pi$  jön tekintetbe. Ekkor  $\tau$  csak az egész számokon fut végig; a csoport félig diszkontinuus. Az  $e^{i\tau q}$  és  $e^{i\sigma p}$  mennyiségek (50), (51) alatt megadott reprezentációja most is érvényes; minthogy azonban  $\tau$  csak egész számú értékeket vesz fel, most nincs értelme elvégezni a  $\tau \rightarrow 0$  határátmenetet. Olyan „ $q$  fizikai mennyiség”, amelyet hermitikus alakkal reprezentálhatunk, most egyáltalán nincs is; azonban pl.  $\cos q$  reprezentálható ily módon.

Gyakran célszerű a koordinátákat és az impulzusokat felcserélni,  $\psi(q)$  helyett a  $p$  sajátvektorainak rendszerére vonatkoztatott  $\varphi(p)$  komponenseket használni. Ezek között a kapcsolatot a

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iqp} \varphi(p) dp$$

„Fourier-transzformáció” adja meg.<sup>15</sup> A  $V_\tau$  leképezés ugyanis  $\psi(q)$ -t az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iq(p+\tau)} \varphi(p) dp = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iqp} \varphi(p - \tau) dp$$

függvénybe,  $U$  viszont az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iqp} \cdot e^{-i\sigma p} \varphi(p) dp$$

függvénybe transzformálja. Eszerint

$$\varphi(p) V_\tau = \varphi(p - \tau), \quad \varphi(p) U_\sigma = e^{-i\sigma p} \varphi(p). \quad (53)$$

<sup>15</sup> Plancherel (Rend. Circ. Mat. Palermo 30, 330, 1910) és Titchmarsh (Lond. Math. Soc. Proc. (2) 23, 279, 1924) egy fontos tétele szerint ez a transzformáció minden abszolút négyzetesen integrálható függvényre világos értelemmel bír és megőrzi a függvény négyzetének integrálját (egy  $2\pi$  faktortól eltekintve).



## III. rész. A dinamikai probléma

9. § Az időbeli változás törvénye. Időbeli középértékek. Az eddigiekben elmondottak általános érvényességre tartanak igényt. Nem ilyen kedvező a helyzet a *dinamikai problémával* kapcsolatban, mely szorosan összefügg a térnek és az időnek a kvantumfizikában játszott szerepével. A *térelméletben* a térben és az időben továbbterjedő állapothatározókkal foglalkozunk; a szorosabb értelemben vett mechanika egyetlen független változóval dolgozik: az idővel. A független változók nem mért mennyiségek; azok önkényes koordinatahálózatot képeznek, mellyel a világot felruházzuk. Valamely fizikai mennyiség függése e változóktól nem ellenőrizhető mérésel; csak ha több fizikai mennyiség áll rendelkezésre, juthatunk a független változók kiküszöbölésével a megfigyelhető mennyiségek között fennálló összefüggésekre. Meglehet, hogy ezen állapothatározók között fellépnek egy elektron térkoordinátái is; a mért, valóságosan jelzett hely, és természetesen a valóságosan jelzett idő is, állapothatározók és ugyancsak hermitikus alakokkal reprezentálандók. A vázolt tényállással szemben a nem-relativisztikus mechanika abban a szerencsés helyzetben van, hogy az időt mint állapothatározót nem kell tekintetbe vennie, ugyanakkor a relativisztikus mechanikának a részecskék mérhető térkoordinátaival együtt azok időkoordinátaira is szüksége van. A kvantumelméletet eddig csak arra az esetre dolgozták ki teljesen, amikor az idő az egyetlen független változó, s az idő csak független változóként lép fel.

Minthogy az hermitikus alaknak, mely adott fizikai mennyiséghez tartozik, nincs köze azokhoz az értékekhez, amelyeket a mennyiség az idő folyamán, ekkor vagy akkor felvesz, az hermitikus alak független az idő folyásától. Ami az idő folyásával változik, az egyedül az  $x(t)$  tiszta eset. A *dinamikai törvény* megadja  $x(t)$  infinitezimális megváltozását a  $dt$  elemi időköz folyamán:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{2\pi i}{h} xE. \quad (54)$$

Itt  $iE$  az energiát reprezentáló  $E$  hermitikus alakkal összefüggő infinitezimális unitér leképezés,  $h$  a hatáskvantum. Az  $A(x)$  hermitikus alak  $A(x+dx) - A(x)$  megváltozása  $dt$  idő alatt, mint az könnyen kiszámítható,

$$dA = \frac{2\pi i dt}{h} (EA - AE). \quad (55)$$

Az energiához tartozó hermitikus alak megváltozása zérus:  $dE = 0$ . Ha az energiának megfelelő  $E$  hermitikus alakot főtengelekre transzformáljuk:

$$E(x) = E_1 x_1 \bar{x}_1 + E_2 x_2 \bar{x}_2 + \dots + E_n x_n \bar{x}_n,$$

úgy az 1-től  $n$ -ig futó index a lehetséges kvantumállapotokat jelöli, s az (54) egyenletben a változók szeparálódnak:

$$\frac{dx_v}{dt} = \frac{2\pi i E_v}{h} x_v.$$



Az integrálás azonnal elvégezhető:

$$x_v(t) = x_v e^{\left(\frac{2\pi t E_v}{h}\right)}. \quad (56)$$

Az

$$A(\mathbf{x}) = \sum a_{\mu\nu} x_\mu \bar{x}_\nu$$

hermitikus alak  $t$  idő elmúltával a következő kifejezésbe megy át:

$$\sum a_{\mu\nu} x_\mu(t) \bar{x}_\nu(t) = \sum a_{\mu\nu}(t) x_\mu \bar{x}_\nu,$$

ahol

$$a_{\mu\nu}(t) = a_{\mu\nu} e^{\left(\frac{2\pi t (E_\mu - E_\nu)}{h}\right)}.$$

Az energia főténgelyrendszerében az  $a_\mu$  komponensek egyszerű rezgéseket végeznek a Bohr-féle frekvenciákkal. Az (56) képlet értelmében nemcsak az  $E_\nu$  energiaszintek maradnak változatlanok a mozgás folyamán, hanem a megfelelő  $|x_\nu(t)|^2 = |x_\nu|^2$  gyakoriságok (valószínűségek) is.

Az eddig mondottak zárt rendszerre vonatkoznak. Ha egy zárt rendszeren belül annak egy részrendszerét vesszük szemügyre, mely a rendszer fennmaradó részének hatása alatt áll, amelynek visszahatását a fennmaradó részre azonban elhanyagoljuk, úgy külső erőkkel van dolgunk: a Hamilton-függvény explicite függ az időtől. Az hermitikus alakok, melyek az energiát és a rendszerre jellemző többi  $\alpha$  mennyiséget reprezentálják, az idő függvényei:  $A = A(t; \mathbf{x})$ . Az  $\mathbf{x}(t)$  tiszta eset időbeli változásának törvénye ugyanaz marad. A 6. § (31) képlete lehetővé teszi az időben lejátszódó (54) infinitezimális elforgatások lépésről lépésre való integrális összetevését. Így számítjuk ki az  $U(t_1, t_2)$  elforgatást, amely  $\mathbf{x}(t_1)$ -et  $\mathbf{x}(t_2)$ -be viszi át. Ha a külső behatás csak a  $t_1, t_2$  időközben érvényesül,  $t_1$  előtt és  $t_2$  után viszont zárt a rendszer, úgy az  $U(t_1, t_2)$  mátrixból speciálisan megkaphatjuk, miképpen változtak meg az egyes  $E_\mu$  energiaszintekhez tartozó valószínűségek a behatás következtében. Erre vonatkozik M. Born vizsgálata, melynek tárgyát az adiabata-elv képezi a kvantummechanikában.<sup>16</sup>

Ha az idő nem mérhető mennyiség, hanem csak független változó, akkor csak az olyan összefüggéseknek van konkrét jelentésük, amelyekből az időt kiküszöböltük. Valamely zárt rendszer kvantummechanikájában ilyen tényállás: az az értékkészlet, amelyet valamely adott mennyiség befuthat, azon  $W(\mathbf{x})$  valószínűségek időbeli közéértékei, amelyekkel valamely adott mennyiség adott határok közé eső értékeket felvehet. Ha az

$$\mathbf{x}: x_\nu = c_\nu e(\gamma_\nu) \quad (c_\nu \geq 0, \gamma_\nu \text{ valós})$$

tiszta esettel van dolgunk, úgy  $\mathbf{x}(t)$  (56) szerint — ha az energiaszintek nem tesznek eleget speciális lineáris racionalitási feltételeknek —, egyenletes sűrűséggel futja be az

$$|x_1| = c_1, |x_2| = c_2, \dots, |x_n| = c_n$$

összefüggéssel definiált  $n$  valós dimenziójú  $\mathfrak{H}$  alakzatot. Kivételes esetekben a dimenziószám csökken.<sup>17</sup> Az időbeli közéértékek kiszámítása úgy történik, hogy erre az időgörbe által egyenletesen kitöltött  $\mathfrak{H}$  tartományra integrálunk.

<sup>16</sup> ZS. f. Phys. 40, 167, 1927.

<sup>17</sup> Vö. H. Weyl, Über die Gleichverteilung von Zahlen mod. Eins, Math. Ann. 77, 313, 1916.



Röviden emlékeztetek még az energiának és a Hamilton-féle egyenleteknek a kanonikus változókhoz való viszonyára. Ha a mechanikai rendszer egy szabadsági fokú, s a kanonikus változók valamely (42) függvényét a (41) mátrix reprezentálja, úgy megállapításunk szerint a  $\frac{\partial f}{\partial p} = f_p$ ,  $\frac{\partial f}{\partial q} = f_q$  deriváltak az

$$F_p = i \int_{-\infty}^{+\infty} e(\sigma P + \tau Q) \sigma \xi(\sigma, \tau) d\sigma d\tau,$$

$$F_q = i \int_{-\infty}^{+\infty} e(\sigma P + \tau Q) \tau \xi(\sigma, \tau) d\sigma d\tau$$

mátrixokkal reprezentálандók, mivel  $f_p$ -re és  $f_q$ -ra hasonló Fourier-kifejtések érvényesek. A (38) összefüggés folytán a (35) felcserélési szabály, ha  $U(\tau)$ -t infinitezimálisnak választjuk, a

$$Pe(\sigma P + \tau Q) - e(\sigma P + \tau Q)P = \tau e(\sigma P + \tau Q),$$

$$Qe(\sigma P + \tau Q) - e(\sigma P + \tau Q)Q = -\sigma e(\sigma P + \tau Q)$$

egyenleteket szolgáltatja; így tehát

$$-F_p = i(QF - FQ), \quad F_p = i(PF - FP).$$

Az (54) dinamikai törvény ennek folytán, ha az energiafüggvényt  $f(p, q)$  jelöli, (55) szerint a következő alakban fogalmazható meg:

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{2\pi}{h} F_q, \quad \frac{dQ}{dt} = \frac{2\pi}{h} F_p.$$

Innen látható: ha  $a$  és  $b$  két olyan valós szám, melyek szorzata  $h/2\pi$ , úgy  $aP$  és  $bQ$  kanonikus mennyiségeket reprezentálnak *abban az értelemben, hogy a klasszikus mozgásegyenletek érvényesek rájuk*. Ily módon konkrét példákon elvégezhetjük az energiának mint a csoportalgebrához tartozó mennyiségnek a meghatározását. Az ilyen leírás mellett a hatáskvantum *csak egyszer fordul elő*: a dinamikai törvényben a felcserélési összefüggésekben nem lép fel. Mindennek az a meggyőződés képezi az alapját, miszerint a klasszikus fizika formális összefüggései a reprezentáló mátrixok, és nem a felvett értékek között érvényes összefüggések alakjában maradnak fenn.

Ha a régi, pre-relativisztikus mechanika kritika tárgyává tett időfogalmának fogatkozásaitól meg kívánunk szabadulni, úgy a mérhető mennyiségek: a  $t$  idő és az  $E$  energia mint kanonikusan konjugált pár lépnek fel, amint az már az analitikus mechanika hatáselve alapján felismerhető; a dinamikai törvény ily módon teljesen figyelmen kívül marad. Az elektron tárgyalása elektromágneses tér jelenlétében a relativitáselmélet szerint, amit Schrödinger és mások adtak meg, már ennek az álláspontnak felel meg.<sup>18</sup> Az általános megfogalmazás még nem ismeretes.

10. § *Kinetikus energia és Coulomb-erő a relativisztikus kvantummechanikában.* Azon szkéma keretén belül, amely csupán az időt engedi meg független változóként,

<sup>18</sup> Lásd pl. E. Schrödinger, Abhandlungen zur Wellenmechanik, Leipzig, 1927, 163. old. = Ann. d. Phys. (4/81, 133, 1926)



legalább egy félig relativisztikus mechanika lehetséges, mely a kinetikus energia számára a helyes kifejezést használja, a potenciális energiát azonban, mint eddig is a helykoordináták függvénye — pontosabban szólva: *egyidejű értékeik függvénye* — alakjában feltételezi. Az elmélet szemléltetése céljából egy vagy több részecske esetét tárgyalom, melynek helyzetét  $x, y, z$  derékszögű koordinátái jellemzik. A kinetikus energia kifejezése a megfelelő  $u, v, w$  impulzusok függvényeként a következő alakú:

$$c\sqrt{m^2c^2 + u^2 + v^2 + w^2},$$

ahol  $m$  a részecske tömege és  $c$  a fénysebesség. A számítás elvégzése szempontjából célszerű, ha részecskék koordinátáit és impulzusait a  $\frac{h}{2\pi mc}$ , ill.  $mc$  mértékegységekben fejezzük ki; azok ekkor dimenziótlan mennyiségek, s egyszersmind összhangban állnak a kanonikus koordináták fent javasolt normálásával. A feladat: megszerkeszteni azt a leképezést vagy hermitikus alakot, amely a  $\psi(x, y, z)$  függvények terében ennek a mennyiségnek megfelel. Példaként szolgáljon az egydimenziós eset. A  $\sqrt{1+u^2}$  függvény Fourier-felbontását kell elvégeznünk. Korábbi megjegyzéseink értelmében ezt a függvényt mondjuk, az

$$e^{-\alpha|u|\sqrt{1+u^2}} \quad (57)$$

függvénnyel kell helyettesítenünk, ahol  $\alpha$  kicsiny pozitív szám, majd  $\alpha$ -val 0-hoz kell tartanunk. Legyen

$$\frac{1}{\pi} \Re \int_0^\infty e^{-\alpha u} \sqrt{1+u^2} e^{-i\sigma u} du = G_\alpha(\sigma); \quad (58)$$

ekkor az (57) mennyiségnek megfelelő leképezés

$$\psi(x) \rightarrow \psi'_\alpha(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x-\sigma) G_\alpha(\sigma) d\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} G_\alpha(x-\xi) \psi(\xi) d\xi; \quad (59)$$

a tetszőleges  $\psi(x)$  függvénnyel képezett hermitikus alak:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_\alpha(x-\xi) \psi(x) \bar{\psi}(\xi) dx d\xi.$$

Ahhoz, hogy a  $G_\alpha(\sigma)$  páros függvényen  $\sigma > 0$  mellett elvégezzük az  $\alpha = 0$  határmenetet, az integrálban, melynek valós része (58) szerint  $\pi G_\alpha(\sigma)$ -t állítja elő, az integrációs utat átvisszük a negatív képzetes féltengelyre:  $u = -it$ ; az  $u = -i$  szingularitást jobbfelől kerüljük meg:

$$-i \int_0^1 e^{-(\sigma-ix)t} \sqrt{1-t^2} dt - \int_1^\infty e^{-(\sigma-ix)t} \sqrt{t^2-1} dt. \quad (60)$$

Az  $\alpha = 0$  határesetben tehát a valós rész

$$G(\sigma) = -\frac{1}{\pi} \int_1^\infty e^{-\sigma t} \sqrt{t^2-1} dt \quad (\sigma > 0).$$



Innen azonnal leolvasható, hogy

$$-G(\sigma) = \frac{1}{\pi\sigma^2} - \Gamma(\sigma),$$

ahol  $\Gamma$  a  $\sigma=0$  helyen már csak logaritmikusan válik végtelenné. Az (59) kifejezésben az  $\alpha=0$  határátmenet a  $\Gamma$ -részen nem okoz nehézséget. A (60) kifejezésben az első összeadandó  $\alpha+i\sigma=0$  mellett reguláris, a második azon  $H$  elsőrendű Hankel-féle hengerfüggvénnyel függ össze, amely pozitív, növekvő  $\sigma$  mellett exponenciálisan zérushoz tart; az ugyanis  $= \frac{H(\alpha+i\sigma)}{\alpha+i\sigma}$ . Ezért egy additive fellépő résztől eltekintve, mely az  $\alpha+i\sigma$  kritikus helyen csak logaritmikusan válik végtelenné,

$$G_\alpha(\sigma) \sim -\frac{1}{\pi} \Re \frac{1}{(\sigma-i\alpha)^2}.$$

Így kapjuk a kinetikus energia reprezentánsaként a

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \psi^*(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(x-\xi) \psi(\xi) d\xi, \quad (61)$$

$$\psi^*(x) = \lim_{z \rightarrow x} \Re \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi(\xi) d\xi}{(z-\xi)^2}$$

leképezést (az egyszerűség kedvéért  $\psi$ -t valósnak vettük). A határátmenetet úgy kell értenünk, hogy a komplex  $z = x + iy$  imaginárius része,  $y$ , pozitív és  $y$  zérushoz tart. Az utóbbi egyenletben az  $\Re$  jel mögött álló integrál az  $i$ -szerese azon analitikus függvény deriváltjának a felső félsíkon ( $y > 0$ ), amelynek  $\psi$  valós része a valós tengelyen a mi  $\psi(x)$ -ünkkel egybeesik. Eszerint  $-\psi^*(x)$  ezen potenciálfüggvénynek a belső  $n$  normális szerint képezett  $\frac{d\psi}{dn}$  deriváltja a peremen. Minthogy  $-\psi \frac{d\psi}{dn}$ -nek a peremre kiterjesztett integrálja nem más, mint a  $D(\psi)$  Dirichlet-integrál a felső félsíkra kiterjesztve, a  $\sqrt{1+u^2}$  mennyiséghez tartozó hermitikus alakra végül kapjuk:

$$D(\psi) + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(x-\xi) \psi(x) \psi(\xi) dx d\xi.$$

Ha egyetlen részecskével van dolgunk, és a potenciális energia (az  $mc^2$  egységben mérve)  $V(x)$ , úgy a sajátértékprobléma abban áll, hogy a

$$D(\psi) + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(x-\xi) \psi(x) \psi(\xi) dx d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) \psi^2(x) dx$$

kifejezést szélsőértékké tegyük az  $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2 dx = 1$  feltétel mellett. A  $\lambda$  szélsőértékek az energiaszintek.

Világos, hogy a (61) operációnak, ha azt kétszer alkalmazzuk, ahhoz kell vezetnie, amely  $1+u^2$ -nek felel meg, azaz a  $\psi(x) + \frac{d^2\psi}{dx^2}$  kifejezéshez. Ezért az egyetlen



részecskére vonatkozó hullámmegyenlet közönséges differenciálegyenlet alakjában is felírható:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \psi(x) = (\lambda - V(x))^2 \psi(x).$$

Itt azonban a  $\lambda$  sajátértékparaméter már nem lineárisan lép fel, s az energiaértékek fele hamis. Ily módon Schrödingernek és P. Epsteinnek sikerült relativisztikusan kiszámítani a hidrogén energiaszintjeit és sajátfüggvényeit.<sup>19</sup> Ha azonban több részecskével van dolgunk, lehetetlenség iterációval differenciálegyenletekhez jutni.

Ha a ható erők *Coulomb-erők*, melyek a rögzített magból erednek, célszerű a tiszta eseteknek az impulzus-komponensek főtengeley-rendszerére vonatkoztatott komponenseit használni. A kinetikus energiát ekkor egyszerűen a

$$\varphi \rightarrow \varphi': \varphi'(u, v, w) = \sqrt{1 + s^2} \varphi(u, v, w) \\ (s^2 = u^2 + v^2 + w^2)$$

szorzás reprezentálja. Meg kell találnunk a reprezentáló hermitikus alakot az  $1/r$  potenciál számára ( $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ). Konvergencia-okokból először helyettesítsük  $1/r$ -et  $\frac{e^{-lr}}{r}$ -rel, ahol  $l$  kicsiny pozitív konstans. Az ezen függvény Fourier-felbontásában szereplő

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-lr}}{r} e^{-i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} dx dy dz$$

integrálra kapjuk polárkoordináták bevezetésével:

$$\frac{4\pi}{l^2 + \sigma^2} \quad (\sigma^2 = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2).$$

A keresett leképezés tehát  $\varphi(u, v, w)$ -t a következő függvénybe viszi át:

$$\left. \begin{aligned} P\varphi(u, v, w) &= \frac{1}{2\pi^2} \iiint_{-\infty}^{+\infty} \varphi(u + \alpha, v + \beta, w + \gamma) \frac{d\alpha d\beta d\gamma}{\sigma^2} \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varphi(\alpha, \beta, \gamma) d\alpha d\beta d\gamma}{(u - \alpha)^2 + (v - \beta)^2 + (w - \gamma)^2} \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty M_\sigma(\varphi) d\sigma. \end{aligned} \right\} \quad (62)$$

Az utóbbi alakban  $M_\sigma(\varphi)$  a  $\varphi$  függvény középtékét jelenti az impulzustér  $(u, v, w)$  centrumú,  $\sigma$  sugarú gömbjén. Ha  $l$ -et egyelőre megtartjuk, úgy a (62) kifejezésben a nevezőben még fellép az  $l^2$  összeadandó. Az ily módon kapott függvény az  $u, v, w, l$  koordinátákkal leírt négydimenziós térben az  $l=0$  „síkban” elhelyezkedő  $\varphi$  sűrű-

<sup>19</sup> E. Schrödinger, Abhandlungen zur Wellenmechanik, 1927; 164. old. = Ann. d. Phys. (4) 81, 134, 1926. P. S. Epstein, Two Remarks on Schrödinger's Quantum Theory, Proc. Amer. Nat. Acad. 13, 94, 1927.



ségű tömegeloszlástól származó  $F$  potenciálfüggvény.  $\mathbf{P}\varphi$  ezen potenciálfüggvénynek a tömegeloszlás síkjában felvett értékeit adja meg.

Minthogy

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\alpha d\beta d\gamma}{r_{10}^2 r_{20}^2} = \frac{\text{const}}{r_{12}},$$

ahol  $1, 2, 0 = (\alpha\beta\gamma)$  három pontot jelöl az impulzéstérben,  $r_{10}$ ,  $r_{20}$  és  $r_{12}$  pedig a három távolságot ezek között, a  $\mathbf{P}$  operáció  $\mathbf{P}^2$  ismétlése a háromdimenziós impulzustérben  $\varphi$ -t a  $\varphi$  keltette  $\Phi$  potenciálfüggvénybe viszi át. Tudvalevőleg fennáll:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial v^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial w^2} = \varphi.$$

Szeparáljunk gömbfüggvények szerint. Felhasználva az  $F$  fent említett négydimenziós harmonikus függvényt s az

$$F = Y_n F(s, l)$$

feltevéssel élve, hol az  $Y_n$   $n$ -edrendű gömbfüggvény csak az  $u:v:w$  iránytól függ, kapjuk, hogy a csak  $s$ -től és  $l$ -től függő  $F$  faktor az  $l > 0$  felső féltérben a

$$\frac{\partial}{\partial s} \left( s^2 \frac{\partial F}{\partial s} \right) + s^2 \frac{\partial^2 F}{\partial l^2} = n(n+1)F$$

egyenletnek tesz eleget; a  $\mathbf{P}$  operáció a normális derivált peremértékeiről a függvény peremértékeire való áttérést jelenti. Talán célszerűbb  $F(s, l)$  helyett az  $sF(s, l) = F^*(s, l)$  függvényt használni. Erre a következő differenciálegyenlet érvényes:

$$\frac{\partial^2 F^*}{\partial s^2} + \frac{\partial^2 F^*}{\partial l^2} = \frac{n(n+1)}{s^2} F^*.$$

Az  $F^*$  függvény az  $(s, l)$  sík  $l > 0$  felső felén van értelmezve; az  $l$ -tengelyre való tükrözéssel szemben ez páratlan függvény. — Ha (62) alatt az  $1/R^2$  faktort, ahol

$$R^2 = (u-\alpha)^2 + (v-\beta)^2 + (w-\gamma)^2 = s^2 + \sigma^2 - 2s\sigma \cos \vartheta,$$

kifejtjük a  $P_n(\cos \vartheta)$  gömbfüggvények szerint:

$$\frac{1}{R^2} = \frac{1}{4s\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) L_n P_n(\cos \vartheta),$$

bevezetve a

$$\varphi = Y_n s \varphi^*(s)$$

képlettel értelmezett  $\varphi$  függvényt, a  $\mathbf{P}$  operáció ezen függvényekre gyakorolt hatására kapjuk:

$$\varphi^*(s) \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} L_n \left( \frac{s^2 + \sigma^2}{2s\sigma} \right) \varphi^*(\sigma) d\sigma,$$

$$L_n(t) = \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(x) dx}{t-x}.$$



Ha egytest-problémával állunk szemben, akkor — habár fennáll a veszély, hogy ily módon a hamis sajátértékek egész sorozatát csempésszük be — a  $\mathbf{P}$  operációt iterálhatjuk s ily módon tiszta differenciálegyenletre juthatunk. A nem-relativisztikus hidrogén-atom  $\varphi_n(u, v, w)$  sajátfüggvényei, melyek a  $\psi_n(x, y, z)$  Schrödinger-féle sajátfüggvényekből — a Laguerre-polinomokból — Fourier-transzformációval állnak elő, disszertációmban vannak megadva.<sup>20</sup> Azok igen szépen megkaphatók az itt vázolt módszerrel. A többtestproblémában az iterációs módszer felmondja a szolgálatot.

*Coulomb-erők több, mozgó részecske között.* Az 1 és 2 részecske  $1/r_{12}$  reciproktávolságának a  $\varphi(u_1, v_1, w_1; u_2, v_2, w_2)$  impulzusfüggvények használata mellett a

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(u_1 + \alpha, v_1 + \beta, w_1 + \gamma; u_2 + \alpha, v_2 + \beta, w_2 + \gamma) \frac{d\alpha d\beta d\gamma}{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2}$$

leképezés felel meg. Ez a fentiekhez hasonlóan állapítható meg. Ez a jelölés természetesen nem zárja ki, hogy  $\varphi$  a többi részecske impulzusától is függ; ezeket azonban a transzformáció nem érinti.

### Matematikai függelék

*Tétel unitér transzformációk főtengetytranszformációjára vonatkozóan.* Ha adott az  $A = \|a_{ik}\|$  unitér leképezés, keresünk egy olyan  $\mathbf{x} \neq 0$  vektort, melyet  $A$  önmaga többszörösebe viszi át:

$$\mathbf{x}A = \varepsilon \mathbf{x} \quad \text{vagy} \quad \sum_{i=1}^n a_{ik} x_i = \varepsilon x_k. \quad (63)$$

Legyen  $\varepsilon$  a

$$\det(\varepsilon \mathbf{1} - A) = 0$$

szekuláris egyenlet gyöke; ekkor tényleg létezik ilyen  $\mathbf{x} = \mathbf{e}_1$  vektor. Normáljuk ezt egyre, és egészítsük ki további  $n-1$  vektorral:  $\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \dots, \mathbf{e}_n$  egy normális koordinátarendszerré. Minthogy ebben a rendszerben a (63) egyenletek  $\mathbf{e}_1$ -re (azaz  $x_1 = 1, x_2 = 0, \dots, x_n = 0$  mellett) teljesülnek, most

$$a_{11} = \varepsilon, \quad a_{12} = \dots = a_{1n} = 0.$$

A koefficiensek első sorának abszolútérték-négyzetösszege 1 kell, hogy legyen; ezért  $|\varepsilon| = 1$ . De az első oszlopban álló elemek abszolútérték-négyzetösszegének is egygyel kell egyenlőnek lennie; ily módon kapjuk:

$$1 + |a_{21}|^2 + \dots + |a_{n1}|^2 = 1, \quad a_{21} = \dots = a_{n1} = 0.$$

<sup>20</sup> Math. Ann. 66, 307—309, 317—324, 1908.



Ez a döntő következtetés. Az  $A$  mátrix tehát az alábbi skémából látható módon felbomlik:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

Az  $n$  dimenziószámra vonatkozó indukció teljessé teszi a bizonyítást.

Ha az  $A$  unitér leképezés normálalakban áll előttünk, és a főátlóban álló elemeket  $a_i$ -vel jelöljük, úgy a (63) egyenletnek azok és csak azok a vektorok tesznek eleget, amelyek az  $a_i = \varepsilon$ -hoz tartozó alapvektorokból tevődnek össze. Innen kitűnik, hogy a különböző  $a', a'', \dots$  sajátértékeket multiplicitásaikkal és a megfelelő — az 1. §-ban említett —  $\mathfrak{R}(a'), \mathfrak{R}(a''), \dots$  alterekkel együtt egyértelműen meghatározza.

Ha  $A = \|a_{ik}\|$ ,  $B = \|b_{ik}\|$  felcserélhető unitér mátrixok, akkor egyidejűleg főtengelekre transzformálhatók. Bizonyítás: Mindjárt feltehetjük, hogy  $A$  normál alakú, melyben csak a főátlóban állnak zérustól különböző  $a_i$  elemek. A felcserélhetőségre vonatkozó követelményünk szerint

$$(a_i - a_k)b_{ik} = 0 \quad (64)$$

Az indexeket osztályokba soroljuk:  $i$  és  $k$  egy osztályba tartozik, ha  $a_i = a_k$ . A (64) egyenlet szerint  $b_{ik} = 0$ , ha az  $i$  és  $k$  indexek különböző osztályokba tartoznak; azaz  $B$  éppen olyan módon bomlik fel a  $B', B'', \dots$  almátrixokra, melyek a főátló mentén sorakoznak, mint ahogy az  $a_i$ -k az egyenlő sajátértékeket tartalmazó osztályokra oszlanak:  $a', a'', \dots$ . A  $B$  leképezés az  $a', a'', \dots$  sajátértékekhez tartozó  $\mathfrak{R}(a'), \mathfrak{R}(a''), \dots$  altereket egyenként változatlanul hagyják. Az  $A$  normálalak nem romlik el, ha az egy osztályba tartozó változókat unitér transzformációnak vetjük alá. Ezeket az unitér transzformációkat az  $\mathfrak{R}(a'), \mathfrak{R}(a''), \dots$  terekben egyenként alkalmasan választva a  $B', B'', \dots$  mátrixok rendre normálalakra hozhatók. — Az eljárás minden további nélkül átvihető unitér mátrixok bármely kommutatív halmazára.

Az hermitikus alakok főtengeleytranszformációjára vonatkozó tétel a most bebizonyított tétel határeseté, de ugyanezen módszerrel közvetlenül is levezethető. Most

$$a_{12} = \dots = a_{1n} = 0\text{-ból} \quad a_{21} = \dots = a_{n1} = 0\text{-ra}$$

az  $a_{ki} = \bar{a}_{ik}$  szimmetriafeltétel alapján következtethetünk.

Azon tétel bizonyítása, mely szerint az  $A$  unitér leképezés szükségképpen  $= \varepsilon \mathbf{1}$ , ha valamely  $\mathfrak{U}$  irreducibilis rendszer minden mátrixával felcserélhető. Vezessük be azt a normális koordinátarendszert, amelyben  $A$  átlós mátrix az  $a_i$  sajátértékekkel. Ha az  $a$ -k nem mind egyenlők, úgy az adott halmaz  $U$  mátrixai valamennyien felbomlanak annak megfelelően, ahogy az  $a_i$ -k az egyenlő sajátértékeket tartalmazó osztályokra oszlanak;  $A$  tehát az  $\mathfrak{U}$  rendszer valamennyi mátrixának szimultán felbomlását eredményezi.



A nemelfajult antiszimmetrikus valós

$$\sum_{i,k=1}^f c_{ik} x_i y_k \quad (c_{ki} = -c_{ik}) \quad (65)$$

bilinéaris alak lineáris transzformációjára vonatkozó tételt így bizonyítjuk. Az  $(x_1, x_2, \dots, x_f)$  számrendszert mint  $\mathbf{x}$  vektort fogjuk fel és (65)-öt az  $\mathbf{x}$  és  $\mathbf{y} = (y_i)$  vektorok  $[\mathbf{x}\mathbf{y}]$  antiszimmetrikus szorzatának nevezzük. Válasszunk egy  $\mathbf{e}_1 \neq 0$  vektort. A feltevés szerint  $[\mathbf{e}_1 \mathbf{x}]$  az  $\mathbf{x}$ -ben azonosan nem tűnik el; találhatunk tehát egy második  $\mathbf{e}_2$  vektort oly módon, hogy  $[\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2] = 1$ . A szimultán kielégítendő

$$[\mathbf{e}_1 \mathbf{x}] = 0, \quad [\mathbf{e}_2 \mathbf{x}] = 0$$

egyenleteknek legalább  $f-2$ -számú független  $\mathbf{e}_3, \dots, \mathbf{e}_f$  megoldása van. A  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \dots, \mathbf{e}_f$  vektorok között nem áll fenn lineáris összefüggés. Ha ugyanis

$$\mathbf{x} = \xi_1 \mathbf{e}_1 + \xi_2 \mathbf{e}_2 + \xi_3 \mathbf{e}_3 + \dots + \xi_f \mathbf{e}_f = 0,$$

úgy képezve az  $[\mathbf{e}_1 \mathbf{x}] = \xi_2$ ,  $[\mathbf{e}_2 \mathbf{x}] = -\xi_1$  antiszimmetrikus szorzatokat,  $\xi_1 = \xi_2 = 0$  adódik. Az  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_f$  vektorokat tehát mint koordinátarendszert, mint alarendszert használhatjuk. Az  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  vektoroknak ezen alarendszerre vonatkozó  $\xi_i, \eta_i$  komponenseivel kifejezve az antiszimmetrikus szorzat a következőképpen fest:

$$[\mathbf{x}\mathbf{y}] = \sum_{i,k=1}^f \gamma_{ik} \xi_i \eta_k.$$

Az alapvektorok meghatározásának megfelelően a  $\gamma_{ik} = [\mathbf{e}_i \mathbf{e}_k]$  együtthatók a következő alakúak:

$$\gamma_{11} = 0, \quad \gamma_{12} = 1; \quad \gamma_{13} = 0, \dots, \gamma_{1f} = 0,$$

$$\gamma_{21} = -1, \quad \gamma_{22} = 0; \quad \gamma_{23} = 0, \dots, \gamma_{2f} = 0.$$

Az antiszimmetria folytán így valamennyi  $\gamma_{i1}, \gamma_{i2}$  ( $i=3, \dots, f$ ) egyenlő zérussal; a  $\gamma_{ik}$ -k mátrixa a  $2 \times 2$ -es  $\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix}$  mátrixra és egy  $(f-2)$ -dimenziós antiszimmetrikus mátrixra bomlik fel. Az  $f$ -re vonatkozó indukcióval adódik az állított tétel.

Fordította: Györgyi Géza



# KÖNYVISMERTETÉS

## A HADRON SPEKTROSKÓPIAI SZIMPÓZIUM ELŐADÁSAI

A balatoni részecskefizikai szimpóziumok sorában a legutóbbit 1968. szeptember 6—11-ig rendezték meg Keszthelyen. A szimpóziumon elhangzott előadásokat (az összefoglaló előadásokat és a rövid beszámolók nagy részét) az *Acta Physica Hungarica* 26. kötete nyomán az Akadémiai Kiadó most könyv alakjában is kiadta.

A keszthelyi szimpózium közvetlenül a bécsi Nemzetközi Nagyenergiájú Fizikai Konferencia után került megrendezésre. Neves külföldi résztvevői, mint például a török *A. Barut* és *F. Gürsey*, a cambridge-i *B. Renner*, az amerikai *F. Low* és *M. Nauenberg*, a japán *S. Okubo* és *M. Suzuki* a nagyenergiás elméleti fizika nemzetközi élvonalát képviselik. Rajtuk kívül még számos külföldi és hazai fizikus részvétele fémjelezte a szimpóziumot. Így az előadások szinte teljes keresztmetszetét adták a részecskefizika modern törekvéseinek és legfrissebb eredményeinek. *F. Low* például a multiperiferikus modelltől és a magasabbrendű gyenge kölcsönhatások problémáiról beszélt, *B. Renner* a chirális szimmetriáértésről, *C. Goebel* pedig a bécsi konferencia talán legjelentősebb újdonságáról a Veneziano-modellről. A magyar előadások közül kiemelkedett *Surányi Péter* összefoglalója a relativisztikus előre-szórás csoportelméleti leírásáról és *Nagy Tibor* előadása a meta-stabil hadronok gyenge bomlásairól.

A számos előadás közül, melynek eredeti angol szövegét a könyv tartalmazza, természetesen csak szubjektív alapon lehet néhányat kiemelni. Az azonban kétségtelen, hogy a szimpózium nemzetközi rangú volt, és az Akadémiai Kiadó valós (nemzetközileg is jelentkező) igényt elégített ki, amikor az összegyűjtött előadásokat kiadta. A könyv igen izléses, igényes kivitelű. Sajnálatos azonban, hogy — elsősorban a képletekben — elég sok sajtóhibát tartalmaz.

Montvay István

E. Fenyves, O. Haiman:

## THE PHYSICAL PRINCIPLES OF NUCLEAR RADIATION MEASUREMENTS

Akadémiai Kiadó, Budapest. 1969. 590 oldal

A könyv az Appendixen kívül 8 fejezetet tartalmaz. Az első két fejezetben a magsugárzások és az anyag kölcsönhatásával kapcsolatos alapelvek, kísérleti eredmények, kvantitatív összefüggések összefoglalását találjuk. Erre épül, de még mindig a későbbiek megalapozását szolgálja a harmadik fejezet, amelyben szerzők a különböző elven működő detektorokban lejátszódó folyamatokat ismertetik. A 4. fejezet a számlálók, a 7. a részecskenyom-detektorok felépítését és működési elvét tartalmazza, míg az 5., ill. 8. fejezetben a részecskék legfontosabb fizikai tulajdonságainak (energia, sebesség, momentum, ionizálóképesség) meghatározásával kapcsolatos elméleti és gyakorlati kérdések kaptak helyet. A gyakorlati szakember számára értékes segítséget nyújt a 6. fejezet, amely a sugárzások intenzitásának és dózisének mérését ismerteti.

Tulajdonképpen elegendő lenne a jelenlegi angol kiadás borítólapjáról (fülről) lemásolni az ezt megelőző német kiadásról a *Science*-ben, *Nuclear Physics*-ben, *Physikalische Blätter*-ben, megjelent méltatásokat, amelyek egybehangzóan igen értékes, mind a szakemberek, mind a hallgatók számára hasznos, összefoglaló könyvnek tartják Fenyves E. és Haiman O. munkáját, kiemelve a tárgyalt témakörök széles spektrumát, amely felöleli a magsugárzások detektálásával kapcsolatos legfontosabb fizikai, mérés technikai kérdéseket. Teljes egyetértéssel idézhetem azt a véleményt is, amely szerint a tudományos problémák tárgyalásában, a fejlődés folyamatának bemutatásában tapasztalható gondosság teszi igazi tankönyvvé a munkát. Ezek a „kritikák” a mos-



tani angol kiadásra is érvényesek, hiszen az gyakorlatilag megegyezik a német kiadással, és az azóta eltelt időben sem a témával kapcsolatos fizikai elvek, sem azok tárgyalásmódja nem változott. Kivételt képeznek a legújabb mérési eljárások (félvezető detektorok, szikrakamra), elektronikai egységek (az Appendix 2. pontjában), amelyekkel kapcsolatos fejezetek kibővítése, újraírása nagyban növelte a munka időszerűségét.

A magam részéről, az eddigiek mellett még a következő pozitívumokat emelném ki: a könyv kerüli az egyes jelenségek magyarázatával kapcsolatos elméleti megfontolásokat, levezetéseket és csak a gyakorlat számára fontos összefüggéseket ismerteti. Ugyanakkor a rendkívül gazdag irodalmi hivatkozás az érdeklődő szakember számára segítséget ad egy-egy kérdés elmélyültebb, részletesebb feldolgozásához is. Külön kiemelném az Appendix 1. pontját, amelyben a szerzők azokat a mérési, detektálási módszereket ismertetik, amelyek az egyes elemi részecskék felfedezéséhez vezettek. Ez a kb. 25 oldalas rész nemcsak tudománytörténeti szempontból érdekes, hanem mintegy a könyvben ismertetett elvek és módszerek használhatóságának bizonyítékaként is tekinthetjük.

Az utóbbi években soha nem látott fejlődés ment végbe a magsugárzások természetének, anyaggal való kölcsönhatásának kutatása és a sugárzások gyakorlati alkalmazása területén. A fizikusok mellett egyre több vegyész, orvos, biológus, műszaki és agrár szakember alkalmazza a különböző radioizotópos módszereket. Fenyves E. és Haiman O. könyve felépítésénél, tárgyalásmódjánál, szemléletességénél fogva igen értékes segítséget nyújt ezeknek a fizikában járatos, de részletes elméleti és gyakorlati fizikai ismeretekkel nem rendelkező szakembereknek is a detektálási eljárások fizikai elveinek — és nem utolsósorban gyakorlati problémáinak — megértéséhez, elmélyítéséhez.

Gy. S.

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA







Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója  
Műszaki szerkesztő: Merkly László  
A kézirat beérkezett: 1970. III. 17. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 9,45 (A/5) ív  
70-1370 — Szegedi Nyomda



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

Budapest I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:

43-790-057-181 útján eszközölhetők.)



Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26,491

## TARTALOMJEGYZÉK

	Oldal
<i>Schulze Dietrich</i> : Az abszorpció hatása rácshibák transzmissziós elektronmikroszkópos képen- intenzitására .....	289
<i>Vasvári Béla</i> : A kalcium, stroncium és bárium fémek elektronszerkezete II. ....	305

### A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>H. Weyl</i> : Kvantummechanika és csoportelmélet. ....	357
---	-----

### KÖNYVISMERTETÉS

A Hadron Spektroszkópiai Szimpózium Előadásai ( <i>Montvay István</i> ) Akadémiai Kiadó, Buda- pest. 1969 .....	393
<i>E. Fenyves, O. Haiman</i> : The physical principles of nuclear radiation measurements. Akadémiai Kiadó, Budapest. 1969. 590 oldal (Gy. S.) .....	393



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

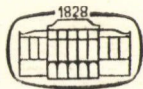
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XVIII. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1970



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánosy Lajos akadémikus  
Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó Budapest V., Alkotmány utca 21., pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43 790 057 181 útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# A KALCIUM, STRONCIUM ÉS BÁRIUM FÉMEK ELEKTRONSZERKEZETE III.\*

VASVÁRI BÉLA  
MTA ATOMKI, Debrecen\*\*

## Függelék

### A) Tércsoportok irreducibilis előállításának bázisvektorai

Ebben a függelékben összefoglaló táblázatokat mutatunk be, melyek segítségével megadhatók a  $G$  tércsoport irreducibilis előállításaihoz tartozó  $f^v$  függvények a lapon centrált köbös rács esetére. Mint az 1.4. fejezetben megmutattuk, e függvények megkeresésére először rögzítjük a  $\mathbf{k}$  pontot. A „kiredukálást” kétféleképpen is elvégeztük. Egyrészt a csoportelmélet szabvány módszereivel lásd pl. *Hamermesh* (1962) könyvében a pontcsoportok karakterrendszerének felhasználásával, másrészt a *Schlosser* (1962) által megadott projekciós operátorok segítségével. Az elég bonyolult és sok helyet elfoglaló formalizmust nem tartjuk szükségesnek itt megismételni, csupán azt jegyezzük meg, hogy véleményünk szerint *Schlosser* cikkének képletei közül néhány hibás. E képletei helyett a következők használandók

$$\Delta_1: (I + R_{23})[i(\pm)j(\pm)k] \quad (\text{A.1})$$

$$\Delta_2: (I - R_{23})[i(\pm)j(\pm)k] \quad (\text{A.2})$$

$$\Delta'_1: (I - R_{23})\{[i \pm j \pm k] - [i \pm j \mp k]\} \quad (\text{A.3})$$

$$\Delta'_2: (I + R_{23})\{[i \pm j \pm k] - [i \pm j \mp k]\} \quad (\text{A.4})$$

Felhasználva a korrigált formulákat egyszerű, csak kissé hosszadalmas számolással juthatunk el azokhoz a függvényekhez, amelyek a tércsoport irreducibilis előállításai szerint transzformálódnak. A függelék (számozatlan) táblázatai tartalmazzák az eredményeket, amelyeknek segítségével a BZ  $\mathbf{k}$  pontjában a kristály teljes  $G$  tércsoportjának  $v$ -edik irreducibilis előállítása szerint transzformálódó függvények közül az  $i$ -edik,

$$f_i^v(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{\mu} g_{i\mu}^v f(\mathbf{k}_{\mu})}{[\sum_{\mu} (g_{i\mu}^v)^2]^{-\frac{1}{2}}} \quad (\text{A.5})$$

alakban állítható elő, ahol a  $g_{i\mu}^v$ -k együtthatók, és az  $f(\mathbf{k}_{\mu})$  függvény a  $\mathbf{k}_{\mu}$  hullám-számvektorhoz tartozó Bloch-függvényt jelenti. A  $g_{i\mu}^v$  együtthatók és az összegben fellépő  $\mathbf{k}_{\mu}$  vektorok megkeresése a következő eljárás segítségével végezhető el (kényelem kedvéért a  $\mathbf{k}_{\mu}$  vektort index helyett  $v$  függelékben  $f$  argumentumába írtuk)

\* Kandidátusi disszertáció III. rész. Megvédve 1967. jún. 20. Az I—II. rész az előző két számban jelent meg.

\*\* Jelenleg KFKI, Budapest.



1. Megválasztjuk a  $\mathbf{k}$  pontot, amelyet *Bouckaert*, *Smoluchowski* és *Wigner* (1936) nyomán jelöltünk. Az 1.4. és 3.2. ábrák segítségével azonosíthatók a  $\mathbf{k}$  koordinátái és a megfelelő jelölések. Például válasszuk a BZ középpontját, ehhez a  $\Gamma$  jel tartozik.

2. Megválasztjuk, hogy melyik irreducibilis előállítás szerint ( $v$ -index) transzformálódó függvényt keressük. A  $v$ -index a táblázatokban összetett index, tartalmazza az előbb választott pont jelét, és ennek indexében különféle számokat vesszünk fel vagy anélkül. Egy egy ilyen összetett index a tércsoport különböző irreducibilis előállításait, — s így a  $\mathbf{k}$  pontbeli energiaértékeket jellemzi. Választott példánkban tovább menve a tekintett irreducibilis előállítás legyen  $\Gamma'_{25}$  (ez most az összetett  $v$ -index).

3. Minden  $\mathbf{k}$  ponthoz — azaz minden különböző  $\Gamma, L, X, \dots$  stb. betűkhöz kétfajta táblázat van adva, melyek I, ill. II. számokkal vannak megkülönböztetve. Következő lépésként a  $\mathbf{k}$  ponthoz tartozó I jelű táblázatok közül megkeressük azt, amely a  $v$ -edik. Példánkban ez a  $I\Gamma, v=\Gamma'_{25}$  táblázat. A táblázat fejlécén futnak végig az  $i$  indexek 1-től 10-ig, kivéve  $\Gamma_1$  táblázatát, ott 15-ig (az  $i$  index nincs külön feltüntetve a táblázatokban). Ez azt jelenti, hogy általában 10 különböző, a  $v$ -edik irreducibilis előállítás szerint transzformálódó  $f_i^v$  függvényt tudunk megadni a táblázatok segítségével. Az  $i$  index növekedésével nő az  $f(\mathbf{k}_\mu)$  Bloch-függvények  $\mathbf{k}_\mu$ -vektorának a reciprok tér origójától mért távolsága, és így egy  $i$ -indexhez azonos hosszúságú  $\mathbf{k}_\mu$ -vektorok tartoznak. Ezen  $\mathbf{k}_\mu$  vektorok egy reprezentánsa található az  $i$  index kiválasztott értéke alatti oszlopban. Példánkban  $i$ -nek válasszunk 4-et, majd 5-öt. Ez alatt található a 222, ill. 133 számhármas, melyek a reprezentáns  $\mathbf{k}_\mu$ -vektor komponenseit jelentik  $2\pi/a=1$  egységekben. A reprezentáns  $\mathbf{k}_\mu$  vektorral egy sorban a táblázat bal oldalán leolvasható a  $\mathbf{k}_\mu$  típusát jellemző betűhármas, példánkban iii, ill. iij.

4. Következő lépésként megkeressük a  $\mathbf{k}$ -vektor II jelű táblázatai közül a  $\mathbf{k}_\mu$ -vektor típusát jellemző betűhármasoz tartozó táblázatot. Példánkban ez tehát a II  $\Gamma_{iii}$ , ill. II  $\Gamma_{iij}$  jelű táblázatok. Ennek fejlécén megkeressük a kiválasztott irreducibilis előállítás jelét (a  $v$  indexet), és ennek oszlopában  $+$ ,  $-$  jeleket, vagy üres helyet vagy számokat találunk. Ezek adják az (A.5) összegben a  $g_{i\mu}^v$  együtthatókat —  $a +$  jel  $+1$ -et,  $a -$  jel  $-1$ -et, az üres hely zérust jelent, egyben ezen együtthatókkal egy sorban, a táblázat első oszlopában található meg az (A.5) összegben szereplő további vektorok komponensei, ha a betűhármas helyébe beírjuk a reprezentáns  $\mathbf{k}_\mu$ -vektor komponenseit. Példánkban tehát az origóhoz tartozó  $\mathbf{k}$  pontban a  $\Gamma'_{25}$ -irreducibilis előállítás szerint transzformálódó 4-ik függvény a következő lesz:

$$f_4^{\Gamma'_{25}} = \frac{1}{\sqrt{8}} [f(222) - f(22-2) - f(2-22) + f(2-2-2) + f(-222) - f(-22-2) - f(-2-22) + f(-2-2-2)], \quad (\text{A. 6})$$

ahol az  $f(222), \dots, f(-2-2-2)$  rendre a  $\mathbf{k}_\mu = (2, 2, 2), \dots$ , ill.  $\mathbf{k}_\mu = (-2, -2, -2)$  vektorokhoz tartozó Bloch-függvényeket jelölik. Ha az 5. bázisfüggvényt akarjuk megkeresni, akkor az I jelű táblázatban a 133 számhármas mellett zárójelben (1)-et, a 6. bázisfüggvényénél (2)-t (másutt esetleg még (3)-at is) találunk, ami azt jelenti, hogy a  $\mathbf{k}_\mu = (133)$  vektorral reprezentált Bloch-függvények terében a  $\Gamma'_{25}$  irreducibilis előállítás kétszer (másutt esetleg háromszor) fordul elő, ennek megfelelően a II jelű



táblázatokban is a  $\Gamma'_{25}$  index mellett az (1), ill. (2) az egyik, ill. másik irreducibilis altér egy-egy vektorát adja meg. Így az 5. bázisvektorunk

$$f_4^{\Gamma'_{25}} = \frac{1}{\sqrt{8}} [f(331) - f(3-31) - f(-331) + f(-3-31) + f(33-1) - f(3-3-1) - f(-33-1) + f(-3-3-1)] \quad (\text{A. 7})$$

lesz.

5. Az az irreducibilis előállítás, melynek indexe nem szerepel a II jelű táblázat fejlécén, az nem lép fel az adott betűhármassal jellemzett Bloch-függvények terében. Így példánkban a 133 típusú  $\mathbf{k}_\mu$ -höz tartozó  $f(\mathbf{k}_\mu)$  Bloch-függvények terében nem lép fel például a  $\Gamma'_1$  vagy  $\Gamma_2$  indexű irreducibilis előállítás, de ugyanakkor a  $\Gamma_{15}$ ,  $\Gamma'_{25}$  reprezentációk kétszer is előfordulnak.

Így a függelék táblázatai segítségével kiszámított,  $f_i^v$  függvényekből  $v = \Gamma_1$  esetén 15-öd, a többi esetben 10-edrendű szekuláris determináns konstruálható az (1.4.4) és (1.4.5) képletek segítségével, melynek eltűnéséből a  $v$ -edik energianívók, példánkban az  $\varepsilon_{\Gamma'_{25}}$  nívók meghatározhatók. Rendszerint csak a legmélyebb 1–2 energianívóra van szükségünk, a többiek olyan magasan gerjesztett állapotokhoz tartoznak, amelyek már nincsenek betöltve.

Megjegyezzük, hogy teljesen hasonló jellegű táblázatokat lehetne megadni a tércentrált köbös kristályrácsra is, ezek közlésével azonban nem akarjuk növelni a disszertáció terjedelmét.

#### B) A nem lokális leárnýékolt modell potenciál Fourier koefficiensei

a) A potenciál (2.3.24)-ben megadott lokális részének Fourier-együtthatója definíció szerint

$$\begin{aligned} V(q) &= \frac{1}{\Omega} \int V_{\text{ion, lokális}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{\Omega} \int_0^\infty (V_{oc} + V_{cc}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} - \frac{A_2}{\Omega} \int_{|\mathbf{r}| < R_M} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} - \frac{Z}{\Omega} \int_{|\mathbf{r}| < R_M} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{r} d^3\mathbf{r} = \\ &= I_1 + I_2 + I_3 \end{aligned} \quad (\text{B. 1})$$

ahol az  $I_1, I_2, I_3$  mennyiségek értelem szerint jelentik a fenti egyenlet jobb oldalán levő három integrált. Kiszámításukat kezdjük  $I_2$ -vel. A  $\mathbf{q}$  vektor irányát tekintve polártengelynek, vezessünk be térbeli polárkoordinátarendszert. Elemi számolással

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{A_2}{\Omega} \int_0^{R_M} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{iqr \cos \theta} \sin \theta r^2 dr d\theta d\varphi = \\ &= -\frac{2\pi A_2}{\Omega} \int_0^{R_M} \int_0^\pi e^{iqr \cos \theta} \sin \theta r^2 dr d\theta = \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= -\frac{2\pi A_2}{\Omega} \int_0^{R_M} \int_{-1}^1 r^2 e^{iqrz} dz dr = -\frac{2\pi A_2}{\Omega} \int_0^{R_M} r^2 \frac{2}{qr} \sin qr dr = \\
&= -\frac{4\pi A_2}{\Omega q} \int_0^{R_M} r \sin qr dr = -\frac{4\pi A_2}{\Omega q^3} \int_0^{qR_M} y \sin y dy = \\
&= -\frac{4\pi A_2}{\Omega q^3} [\sin(qR_M) - qR_M \cos(qR_M)] \quad (\text{atomi egységekben}) \quad (\text{B. 2})
\end{aligned}$$

Rátérve  $I_1$ -re, a korrelációs korrekció (2.2.13) szerint rydbergekben

$$V_{cc} = \begin{cases} -\mu_c(\varrho_v) & \text{ha } r \leq R_c \\ 0 & \text{ha } r > R_c \end{cases} \quad (\text{rydberg}) \quad (\text{B. 3})$$

Tekintettel arra, hogy a valenciaelektronok  $\varrho_v$  sűrűségét állandónak tekintjük, azért e potenciál Fourier koefficiensének kiszámítása ugyanúgy történhet, mint az előző  $I_2$  integrálé, csupán  $A_2$  helyett kell  $\mu_c(\varrho_v)$ -t,  $R_M$  helyett  $R_c$ -t írni, és figyelembe kell venni, hogy  $V_{cc}$  rydbergekben van megadva atomi egységek helyett. Minthogy  $\mu_c(\varrho_v) < 0$ , azért

$$\frac{1}{\Omega} \int_0^\infty V_{oc} e^{iqr} d^3 \mathbf{r} = \frac{4\pi |\mu_c(\varrho_v)|}{\Omega q^3} [\sin(qR_c) - qR_c \cos(qR_c)] \quad (\text{rydberg}) \quad (\text{B. 4})$$

A  $V_{oc}$  ortogonalitási korrekciót a (2.2.2) Poisson egyenlet definiálja. Mindkét oldal Fourier transzformáltját véve

$$V_{oc}^{(q)} = \begin{cases} \frac{4\pi}{q^2} \varrho_{oc}(q) & (\text{atomi egys.}) \\ \frac{8\pi}{q^2} \varrho_{oc}(q) & (\text{rydbergekben}) \end{cases} \quad (\text{B. 5})$$

A  $\varrho_{oc}(\mathbf{r})$  sűrűségfüggvényt (2.2.1) definiálja a (2.2.15)-ben megadott effektív  $\alpha$  együtthatóval,  $\alpha_{\text{eff}}$ -vel. Ennek  $\varrho_{oc}(\mathbf{q})$  Fourier koefficiense ismét az  $I_2$  kiszámításához hasonlóan végezhető, így

$$\begin{aligned}
V_{oc}(q) &= -\frac{8\pi}{q^2} \frac{Z\alpha_{\text{eff}}}{\frac{4\pi}{3} R_c^3} \frac{4\pi}{\Omega q^3} [\sin(qR_c) - qR_c \cos(qR_c)] = \\
&= -\frac{24\pi Z\alpha_{\text{eff}}}{\Omega q^2 (qR_c)^3} [\sin(qR_c) - qR_c \cos(qR_c)] \quad (\text{rydbergekben}) \quad (\text{B. 6})
\end{aligned}$$

Így

$$I_1 = \left[ \frac{4\pi |\mu_c(\varrho_v)|}{\Omega q^3} - \frac{24\pi Z\alpha_{\text{eff}}}{\Omega q^2 (qR_c)^3} \right] [\sin(qR_c) - qR_c \cos(qR_c)] \quad (\text{ry}) \quad (\text{B. 7})$$



Az  $I_3$  kiszámítása érdekében írjuk:

$$I_3 = -\frac{Z}{\Omega} \int_{R_M}^{\infty} \frac{e^{iqr}}{r} d^3\mathbf{r} - \frac{Z}{\Omega} \int_0^{\infty} \frac{e^{iqr}}{r} d^3\mathbf{r} + \frac{Z}{\Omega} \int_0^{R_M} \frac{e^{iqr}}{r} d^3\mathbf{r} \quad (\text{B. 8})$$

Itt az első tag egy  $Z$  pontszerű töltés potenciáljának Fourier koefficiense, melyre jól ismert, hogy értéke rydbergekben  $8\pi Z/q^2$ . Bevezetve ismét a  $\mathbf{q}$ -tengelyű polárrendszert

$$\begin{aligned} I_3 &= -\frac{8\pi Z}{\Omega q^2} + \frac{2Z}{\Omega} \int_0^{R_M} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} e^{iqr \cos \theta} \sin \Theta r dr d\Theta d\varphi = \\ &= -\frac{8\pi Z}{\Omega q^2} + \frac{4\pi Z}{\Omega} \int_0^{R_M} \left( \int_0^{\pi} e^{iqr \cos \theta} \sin \Theta d\Theta \right) r dr = \\ &= -\frac{8\pi Z}{\Omega q^2} + \frac{8\pi Z}{\Omega q} \int_0^{R_M} \sin(qr) dr = \\ &= -\frac{8\pi Z}{\Omega q^2} - \frac{8\pi Z}{\Omega q^2} [\cos(qR_M) - 1] = -\frac{8\pi Z}{\Omega q^2} \cos(qR_M) \text{ (rydbergekben)} \end{aligned} \quad (\text{B. 9})$$

Átírva  $I_2$  értékét (B. 2)-ben rydbergbe, összeadva (B. 7), (B. 9)-cel kapjuk a  $V(q)$  (2.3.26)-ban megadott értékét.

b) *A nem lokális rész* konstans szorzófaktorok mellett a  $P_0, P_1$  operátorokat tartalmazza. A Fourier koefficiens  $F(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ -val jelölve

$$F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \equiv \langle \mathbf{k}' | V_{\text{ion nem lokális}} | \mathbf{k} \rangle = -\sum_{l=0}^1 (A_l - A_2) \langle \mathbf{k}' | P_l | \mathbf{k} \rangle, \quad (\text{B. 10})$$

ahol most a szokásos Dirac bracket csupán az  $|\mathbf{r}| < R_M$  térre vett integrálokat jelenti. A  $P_l$  operátorok hatása (2.1.12) szerint

$$P_l | \mathbf{k} \rangle \equiv P_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \int Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\omega \quad (\text{B. 11})$$

ahol  $d\omega$  az elemi térszöget jelenti. Az  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  függvényt a szóráselméletből jól ismert módon sorbafejtve (lásd pl. Messiah 1961, 358, 489 oldalak):

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{ik \cos \vartheta} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{n+\frac{1}{2}}(kr) P_n(\cos \vartheta) \quad (\text{B. 12})$$



ahol  $J_{n+\frac{1}{2}}$  a feles indexű Bessel függvényeket, a  $P_n(x)$  pedig a Legendre polinomokat jelenti. Behelyettesítve ezt (B. 11)-be

$$P_l|\mathbf{k}\rangle = \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{n+\frac{1}{2}}(kr) I_{lm} \quad (\text{B. 13})$$

ahol

$$I_{lm} = \int Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi') P_n(\cos \vartheta') d\omega \quad (\text{B. 14})$$

Bevezetve a  $P_e^{[m]}$  asszociált Legendre polinomokat

$$(Y_{lm} = N_{lm} P_e^{[m]}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad N_{lm} \text{ normálási együttható!})$$

$$\begin{aligned} I_{lm} &= \int Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi') P_n(\cos \vartheta') d\omega = N_{lm} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} P_e^{[m]} P_n^0 e^{-im\varphi'} \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = \\ &= \frac{4\pi N_{lm}}{2l+1} \delta_{m0} \delta_{nl} \end{aligned} \quad (\text{B. 15})$$

Behelyettesítve ezt (B. 13)-ba

$$\begin{aligned} P_l|\mathbf{k}\rangle &= 4\pi N_{l0} i^l Y_{l0}(\vartheta, \varphi) \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) = 4\pi i^l N_{l0} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) P_l(\cos \vartheta) = \\ &= (2l+1) i^l \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) P_l(\cos \vartheta), \end{aligned} \quad (\text{B. 16})$$

ahol  $\vartheta$  a  $\mathbf{k}$  és  $\mathbf{r}$  vektorok közötti szög.

Képezve  $P_l$  mátrixelemét, ismét polárkoordináta-rendszerben

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | P_l | \mathbf{k} \rangle &= (2l+1) i^l \int_{|\mathbf{r}| < R_M} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) P_l(\cos \vartheta) d^3 \mathbf{r} = \\ &= (2l+1) i^l \int_0^{R_M} r^2 \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) K(\mathbf{k}' r) dr \end{aligned} \quad (\text{B. 17})$$

ahol

$$K_l(k'r) = \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} P_l(\cos \vartheta) d\omega = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-ik'r \cos \vartheta'} P_l(\cos \vartheta) \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' \quad (\text{B. 18})$$

ahol  $\vartheta'$  most a  $\mathbf{k}'$  és  $\mathbf{r}$  vektorok közötti szöget jelenti. Fejezzük ki  $P_l(\cos \vartheta)$ -t a  $\vartheta$  segítségével (lásd pl. Gradstein—Rizsik 1963, 1029. oldal).

$$P_l(\cos \vartheta) = \sum_{s=0}^l \frac{(l-s)!}{(l+s)!} \frac{2}{\lambda_s} P_l^{[s]}(\cos \vartheta') P_l^{[s]}(\cos \Theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} ) \cos s(\varphi' - \Phi) \quad (\text{B. 19})$$

ahol  $\lambda_s = 2$ , ha  $s=0$  és  $\lambda_s = 1$ , ha  $s \neq 0$  és  $\Theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  a  $\mathbf{k}$  és  $\mathbf{k}'$  vektorok,  $\Phi$  pedig az  $(x, y)$



síkra vett vetületeik által bezárt szög. Alkalmazva az  $e^{-ik'r}$ -re is a (B.12) sorfejtést kapjuk:

$$K_l(k'r) = \sum_{s=0}^l \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(l-s)!}{(l+s)!} \frac{2}{\lambda_s} (2n+1) i^n \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{n+\frac{1}{2}}(k'r) \times \\ \times \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} P_l^{[s]}(\cos \vartheta') P_l^{[s]}(\cos \Theta_{kk'}) P_n(\cos \vartheta') \cos s(\varphi' - \Phi) \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' \quad (\text{B. 20})$$

Felhasználva, hogy

$$\int_0^{2\pi} \cos s(\varphi' - \Phi) d\varphi' = 2\pi \delta_{s0} \\ \int_0^{\pi} P_l(\cos \vartheta') P_n(\cos \vartheta') \sin \vartheta' d\vartheta' = \frac{2}{2l+1} \delta_{ln} \quad (\text{B. 21})$$

kapjuk:

$$K_l(k'r) = (2l+1) i^l 4\pi \frac{1}{2l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(k'r) P_l(\cos \Theta_{kk'}) = \\ = 4\pi i^l \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(k'r) P_l(\cos \Theta_{kk'}) \quad (\text{B. 22})$$

Visszatéve ezt (B.17)-be

$$\langle \mathbf{k}' | P_l | \mathbf{k} \rangle = 2\pi (2l+1) (-1)^l I_l(k, k') P_l(\cos \Theta_{kk'}) \quad (\text{B. 23})$$

ahol

$$I_l(k, k') = \int_0^{R_M} r^2 j_l(kr) j_l(k'r) dr \quad (\text{B. 24})$$

és

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x) \quad (\text{B. 25})$$

Az  $I_l(k, k')$  integrál már a Bessel függvényekre érvényes integrálformulák (lásd pl. Gray, Mathews 1952, 69. oldal) segítségével kiszámítható:

$$I_l(k, k') = \frac{1}{k^2 - k'^2} [k R_M^2 j_{l+1}(k R_M) j_l(k' R_M) - k' R_M^2 j_l(k R_M) j_{l+1}(k' R_M)] \quad (\text{B. 26})$$

Felhasználva ezt a  $\langle \mathbf{k}' | P_l | \mathbf{k} \rangle$  matrixelemenben — (B.23) képletben — majd az eredményt visszahelyettesítve (B.10)-be, kapjuk

$$F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = - \sum_{l=0}^1 2\pi (2l+1) (-1)^l (A_l - A_2) \frac{R_M^2}{k^2 - k_1'^2} P_l(\cos \Theta_{kk'}) \times \\ \times [k j_{l+1}(x) j_l(x') - k' j_{l+1}(x') j_l(x)]_{\substack{x=k R_M \\ x'=k' R_M}} \quad (\text{B. 27})$$

ami épp a bizonyítani kívánt (2.3.27) formula.



c) Az  $\varepsilon_q$  dielektromos állandó (2.3.19) képletében először is emlékeztetni kell arra, hogy az  $n(\mathbf{l})$  és  $n(\mathbf{m})$  eloszlásfüggvények mindkettőjének fellépte csupán a kényelmesebb írásmód kedvéért van, ténylegesen csak az  $n(\mathbf{l})$  lép fel plusz egy ugyanilyen jellegű tag komplex konjugáltja. Így a mostani speciális esetben, az energiát rydbergekben számolva

$$I = \sum_{\substack{\mathbf{m} \\ |\mathbf{l}-\mathbf{m}|=q}} \frac{n(\mathbf{l}) - n(\mathbf{m})}{\varepsilon(\mathbf{l}) - \varepsilon(\mathbf{m})} = 4m_{\text{el}}^* \sum_{|\mathbf{m}| < k_F} \frac{1}{l^2 - m^2} \quad (\text{B. 28})$$

A szokásos módon a reciproktérbeli összegzésről integrálásra térve át

$$I = 4m_{\text{el}}^* \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{m}| < k_F} \frac{d^3 \mathbf{m}}{l^2 - m^2} \quad (\text{B. 29})$$

A reciproktér  $Z$ -tengelyét  $\mathbf{q}$  irányában választva, majd polárkoordinátarendszert bevezetve

$$\begin{aligned} I &= \frac{4m_{\text{el}}^* \Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} m^2 \int_0^\pi \frac{\sin \vartheta d\vartheta}{2mg \cos \vartheta + q^2} \int_0^{2\pi} d\varphi dm = \\ &= \frac{m_{\text{el}}^* \Omega}{\pi^2 q} \int_0^{k_F} m^2 \left[ \int_{-1}^1 \frac{dz}{2mz + q} \right] dm = \frac{m_{\text{el}}^* \Omega}{2\pi^2 q} \int_0^{k_F} m \ln \left| \frac{q + 2m}{q - 2m} \right| dm \end{aligned} \quad (\text{B. 30})$$

Az  $m$  szerinti integrál most már elemi úton továbbszámolható, az eredmény atomi egységekben (az energiát rydbergekben) számolva

$$I = \frac{m_{\text{el}}^* \Omega}{2\pi^2} k_F \left[ \frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8qk_F} \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| \right] \quad (\text{B. 31})$$

$I$ -nek ezt az értékét (2.3.19)-be téve azonnal megkapjuk  $\varepsilon_q$ -nak a tényleges numerikus számításokban használt egyszerű képletét, ezt azonban egyéb eredményekkel való összehasonlíthatóság céljából még át szokás kissé alakítani. Mindenekelőtt emlékeztetünk arra, hogy az  $\varepsilon_F$  Fermi energia és az elektrongáz  $n$  sűrűsége között a már említett mértékrendszerben számolva az  $\varepsilon_F = (3\pi n)^{2/3}$  összefüggés érvényes, amiből

$$k_F = \varepsilon_F^{1/2} = \frac{\varepsilon_F^{3/2}}{3\pi^2} \frac{3\pi^2}{\varepsilon_F} = \frac{3\pi^2}{\varepsilon_F} n = \frac{3\pi^2}{\varepsilon_F} \frac{(1 + \alpha_{\text{eff}})Z}{\Omega} \quad (\text{B. 32})$$

Így az  $\varepsilon_q$  dielektromos állandóra (2.3.19)-ből nyerjük, felhasználva (B. 31)–(B. 32)-t

$$\begin{aligned} \varepsilon_q &= 1 - \frac{4\pi}{\Omega q^2} [1 - f(q)] I = \\ &= 1 - \frac{4\pi m^*}{\Omega q^2} \frac{(1 + \alpha_{\text{eff}})Z}{\left(\frac{2}{3} \varepsilon_F\right)} [1 - f(q)] \left[ \frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8qk_F} \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| \right] \end{aligned} \quad (\text{B. 33})$$

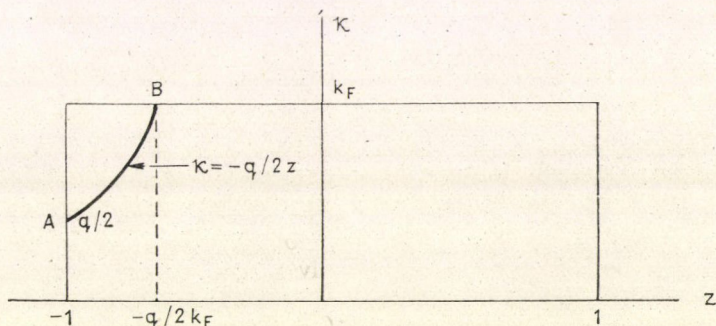
Ez éppen a szövegben megadott (2.3.28) képlet.



d) Az  $I(F)$  kifejezésében ((2.3.20)-as képlet) levő  $F(\mathbf{m}, \mathbf{l})$  függvényekbe írjuk be a (2.3.27)-es képletet és térjünk át ismét az  $\mathbf{m}$ -szerinti összegzésről integrálra, így kapjuk a (2.3.29)—(2.3.30) eredményeket. Az  $L_l$  integrálok azonban most nem kezelhetők analitikusan, mint az  $\varepsilon_q$  kiszámításánál. A numerikus számolásnál pedig gondot kell fordítani arra, hogy az integrandusznak szingularitása van a  $\mathbf{K} = \mathbf{K}'$  helyen, így az integrál főértékét kell venni. Polártengely gyanánt ismét a  $\mathbf{q}$  irányába mutatót választva ( $\mathbf{K}' = \mathbf{K} + \mathbf{q}$ ), szóban forgó integrálunk a számlálót röviden  $G(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$ -val jelölve:

$$L_l = \int_{|\mathbf{K}| < k_F} \frac{G(\mathbf{K}, \mathbf{K}')}{(\mathbf{K}^2 - \mathbf{K}'^2)^2} d^2 \mathbf{K} = \frac{2\pi}{q^2} \int_0^{k_F} \int_0^\pi \frac{G(\mathbf{K}, \mathbf{K}') K^2}{(2k \cos \Theta + q)^2} \sin \Theta d\mathbf{K} d\Theta =$$

$$= \frac{2\pi}{q^2} \int_0^{k_F} \int_{-1}^1 \frac{G(\mathbf{K}, \mathbf{K}')}{(2kz + q)^2} K^2 dz d\mathbf{K}$$
(B. 34)



B.1. ábra. A  $(k, z)$  síkon vett integrációs tartomány és a szingularitás helye az AB hiperbola ág mentén

Az integrandusznak szingularitása van a  $(k, z)$  síkon a  $k = -q/2z$  hiperbola AB szakasza mentén (B.1. ábra), feltéve, hogy  $q < 2k_F$ . (Egyébként nincs szingularitás, s így a numerikus feladat triviális.) Vezessük be az  $(x, y)$  új változókat az

$$\begin{aligned} x &= k \\ y &= 2kz + q \end{aligned}$$
(B. 35)

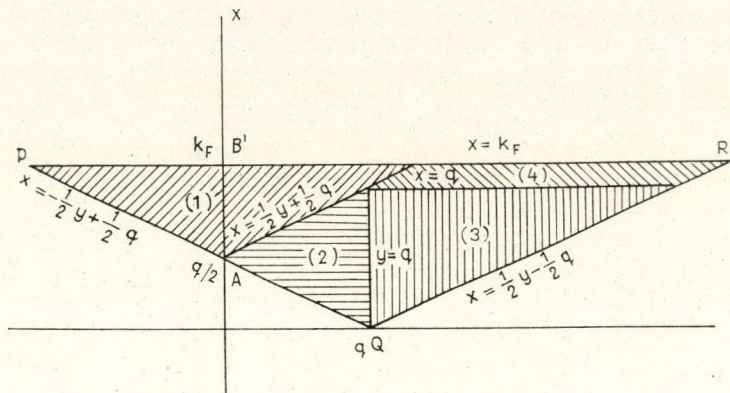
definíciókkal. A transzformáció Jacobi-determinánsa egyszerű számolással  $\partial(k, z)/\partial(k, y) = 1/2k$ , így

$$L_l = \frac{2\pi}{q^2} \iint_T \frac{\bar{G}(x, y)x}{y^2} dx dy$$
(B. 36)

ahol a T integrációs tartomány most az  $(x, y)$  síkon a PQR háromszög és az AB



szakasz, a szingularitás helye jelenleg az  $x$ -tengelyre eső  $AB$  szakaszba ment át (Lásd B.2. ábrát). A numerikus integrálást úgy kell végezni, hogy az  $x$ -tengelyre szimmetrikus résztartományt választunk először, hogy az  $A'B'$  mentén levő szin-



B.2. ábra. A (B.36) integrálban szereplő  $T$  tartomány az  $(x, y)$  síkon, mint az (1), (2), (3) és (4) jelű tartományok összege

gularitások az  $x$ -tengely két oldalán ellentétes előjelű részletösszegeket képezve adják a keresett főértéket. Így a teljes  $PQR$  háromszögön vett integrált rendre az 1, 2, 3, 4-gyel jelölt tartományokon számoltuk, majd összegeztük. A numerikus eljárást az analitikusan is számolható (B.28)-beli  $I$  integrál kiszámításával ellenőrizve a kapott értékek 4 értékes jegy pontosságig megegyeztek.

### C) Perturbációs számítás a magasabb rendű mátrixelemek figyelembevételére

A 3.1. fejezetben alkalmazott perturbációs számításnak az a sajátja, hogy az energiamátrix bizonyos elemeit elsőrendben, a többieket pedig ezek korrekciójaként másodrendben tudjuk figyelembe venni. Pryce (1950) gondolatát alkalmazva bemutatjuk a (3.1.2)-ben felhasznált formula levezetését.

Mint rendszerint, írjuk a rendszer  $H$  Hamilton operátorát a

$$H = H_0 + H_1 \quad (C.1)$$

alakban, és tételezzük fel, hogy  $H_0$  sajátértékproblémája

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (C.2)$$

már megoldott. Az  $E_n$  energianívó lehet degenerált is, ebben az esetben az  $n$  index összetett index. Defináljuk az  $E_n$  sajátértékhez tartozó függvények terébe vetítő  $P_n$  operátort:

$$P_n = |n\rangle\langle n| \quad (C.3)$$

és írjuk  $H$  sajátértékproblémáját a

$$H\psi = E\psi \quad (C.4)$$



alakban. Tételezzük fel, valahonnan tudjuk, hogy a  $\psi$  állapotban várhatóan az  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  állapotok fognak nagyobb súllyal fellépni, más szóval a perturbált  $E$  energia az  $E_0$ ,  $E_1$  energianívók közelében várható. Ez a feltevés pontosan annak felel meg, hogy a LMP alkalmazásától azt várjuk, hogy a szabad elektron közelítésből adódó energiaértékeket (lásd 1.5. fejezet) nem rontja el lényegesen. Így például a  $W_1$ ,  $W'_2$ ,  $W_3$  energiaállapotok a szabad elektron közelítés degenerált legalacsonyabb energiájú állapotából jönnek létre, és ezen állapotokban a  $\psi$  hullámfüggvény is súllyal ugyanazon négy síkhullámból épül fel, mely a szabad elektron közelítésben ehhez a degenerált alapállapothoz tartozik. Írjuk tehát a  $\psi$ -t

$$\psi = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle + \sum_{n \neq 0,1} a_n|n\rangle \quad (\text{C. 5})$$

alakban és tételezzük fel, hogy az  $a_n$  együtthatók már kicsinyek az  $a_0$ ,  $a_1$ -hez képest. (Természetesen csak az egyszerű írásmód kedvéért írtunk mindössze két „nagyobb” együtthatót, az  $a_0$  és  $a_1$ -et.) Betéve  $\psi$ -t (C. 4)-be átrendezéssel:

$$(E_0 - E + H_1)a_0|0\rangle + (E_1 - E + H_1)a_1|1\rangle + \sum_n (E_n - E + H_1)a_n|n\rangle = 0. \quad (\text{C. 6})$$

Alkalmazzuk erre az egyenletre rendre a  $P_0$ ,  $P_1$ ,  $P_n$  projekciós operátorokat. Kapjuk:

$$(E_0 - E + P_0 H_1)a_0|0\rangle + P_0 H_1 a_1|1\rangle + \sum_n P_0 H_1 a_n|n\rangle = 0 \quad (\text{C. 7})$$

$$(P_1 H_1 a_0|0\rangle + (E_1 - E + P_1 H_1)a_1|1\rangle + \sum_n P_1 H_1 a_n|n\rangle = 0 \quad (\text{C. 8})$$

$$P_n H_1 (a_0|0\rangle + a_1|1\rangle) + (E_n - E)a_n|n\rangle + \sum_m P_n H_1 a_m|m\rangle = 0 \quad (\text{C. 9})$$

Közelítésünknek megfelelően az  $|m\rangle$  ( $m \neq 0, 1$ ) altereknek az  $n$ -edikbe eső komponense ( $n \neq 0, 1$ ) már elhanyagolható, ezért az utolsó egyenlet utolsó tagját elhagyjuk. Így (C. 9)-ből

$$a_n|n\rangle = \frac{1}{E - E_n} P_n H_1 (a_0|0\rangle + a_1|1\rangle) \quad (\text{C. 10})$$

Betéve ezt (C. 7)- és (C. 8)-ba és átrendezve:

$$\begin{aligned} \left( E_0 + P_0 H_1 + \sum_n \frac{P_0 H_1 P_n H_n}{E - E_n} - E \right) a_0|0\rangle + \left( P_0 H_1 + \sum_n \frac{P_0 H_1 P_n H_1}{E - E_n} \right) a_0|1\rangle &= 0 \\ \left( P_1 H_1 + \sum_n \frac{P_1 H_1 P_n H_1}{E - E_n} \right) a_0|0\rangle + \left( E_1 + P_1 H_1 + \sum_n \frac{P_1 H_1 P_n H_1}{E - E_n} - E \right) a_1|1\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C. 11})$$

Szorozva az első egyenletet  $|0\rangle$ -val, a másodikat  $|1\rangle$ -gyel az  $a_0$ ,  $a_1$  együtthatókra a szokásos szekuláris egyenletet kapjuk, melynek megoldása akkor van, ha az együtthatók determinánsa eltűnik, amiből rögtön adódik a keresett  $E$  perturbált energia. Elejtve azt a feltevést, hogy csak két állapot játszik lényeges szerepet  $\psi$ -ben, eredményünket általában úgy értelmezhetjük, hogy a keresett  $E$  sajátértékek a

$$H_{ij} = E_i \delta_{ij} + \langle i|H_1|j\rangle + \sum_n \frac{\langle i|H_1|n\rangle \langle n|H_1|j\rangle}{E - E_n} \quad (\text{C. 12})$$



energiamátrix sajátértékei. Valójában a helyzet bonyolultabb, mivel (C.12)-ben a másodrendű korrekcióban a nevezőben is szerepel az ismeretlen  $E$  energiasajátérték. Első közelítésben azonban ezt helyettesíthetjük azzal a perturbálatlan  $E_i$  energiaértékkel, amelyhez közel eső  $E$  perturbált energiát akarjuk kiszámítani.

A 3.1. fejezetbeli alkalmazásoknál  $H_0 = -\nabla^2$ , a  $|n\rangle$  függvények a  $|\mathbf{k} + \mathbf{G}_i\rangle$  síkhullámok az  $E_i$  energiák egyszerűen:  $(\mathbf{k} + \mathbf{G}_i)^2$  és  $H_1$  az  $U$  leárnýkolt modell potenciál.

#### IRODALOM

- Abarenkov, I. V., Heine, V., Phil. Mag., 12, 529, 1965 (idézte II-vel).  
 Abarenkov, I. V., Technical Report No. 2. 1965, (Solid State Theory Group, Cavendish Laboratory, Cambridge, England)  
 Abeles, B., Meiboom, S., Phys. Rev., 95, 31, 1954.  
 Altmann, S. L., Cracknell, A. P., Proc. Phys. Soc., 84, 761, 1964.  
 Anderson, J. R., Gold, A. V., Phys. Rev., 139, A1459, 1965.  
 Animalu, A. O. E., Phil. Mag., 11, 379 1965, (idézte III-mal).  
 Animalu, A. O. E., Heine, V., 1965, (később publikálva, idézte mint IV).  
 Ashcroft, N. W., Phil. Mag., 8, 2055, 1963.  
 Austin, B. J., Heine, V., Sham, L., Phys. Rev., 127, 276, 1962.  
 Balchan, A. S., Drickamer, H. G., Rev. Sci. Instr., 32, 308, 1961.  
 Bardeen, J., Shockley, W., Phys. Rev., 80, 72, 1950.  
 Blatt, F. J., Solid State Physics, 4, 199, 1957.  
 Blume, M., Briggs, N., Brooks, H., Tables of Coulomb Wave Functions. Technical Report No. 260, 1959 (Cambridge Mass.: Cruft Laboratory, Harvard University).  
 Bouckaert, L. P., Smoluchowski, R., Wigner, E., Phys. Rev., 50, 58, 1936.  
 Bridgman, P. W., Proc. Am. Acad. Arts. Sci., 74, 425, 1942.  
 Bridgman, P. W., Proc. Am. Acad. Arts. Sci., 81, 165, 1952.  
 Brooks, H., Ham, F. S., Phys. Rev., 112, 344, 1958.  
 Bundy, F. P., Strong, H. M., Solid State Physics, 11, 81, 1962.  
 Burdick, G. A., Phys. Rev., 129, 138, 1963.  
 Callaway, J. Phys. Rev., 95, 654, 1954.  
 Callaway, J., Energy Band Theory Academic Press, New York, London 1964,  
 Chisholm, J. S. R., Morris, R. M., Mathematical Methods in Physics, 1964, North Holland Publishing Company, Amsterdam.  
 Cohen, M. H., Heine, V., Advances in Phys., 7, 395, 1958.  
 Condon, J. H., Marcus, J. A., Phys. Rev., 134, A446, 1964.  
 Drickamer, H. G., Solid State Physics, 17, 1, 1965.  
 Falicov, L. M., Phyl. Trans. Roy. Soc. London, 255, 55, 1962.  
 Fogarassy, B., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 47, 1965.  
 Frank, V., Jeppesen, O. G., Phys. Rev., 89, 1153, 1950.  
 Gell-Mann, M., Brueckner, K. A., Phys. Rev., 106, 264, 1957.  
 Gerritsen, A. M., Handbuch der Physik, 19, 137, 1956, Springer Verlag, Berlin.  
 Gombás, P., Acta Phys. Hung., 4, 187, 1954.  
 Gombás, P., Az atom statisztikus elmélete és alkalmazásai, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1955.  
 Gombás, P., Acta Phys. Hung., 13, 233, 1961.  
 Gombás, P., Fortschr. Phys., 13, 137, 1965.  
 Gradstein, I. S., Ryzik, I. M., Tablicy integralov, cumm, rjadov u proizvedenij. Goszudarsztvennoe Izdatelstvo, Moszkva. 1963.  
 Gray, A., Mathews, G. B., A Treatise on Bessel Functions. MacMillan, London. 1952.  
 Ham, F. S., Solid State Physics, 1, 127, 1955.  
 Ham, F. S., Phys. Rev., 128, 82, 2524, 1962.  
 Hamermesh, M., Group Theory and its Application to Physical Problems. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts U.S.A. 1962.  
 Harrison, W. A., Phys. Rev., 118, 1182, 1960.  
 Harrison, W. A., Phys. Rev., 131, 2433, 1963.  
 Harrison, W. A., Pseudopotentials in the Theory of Metals. Benjamin, New York. 1966.



- Hartree, D. R., Hartree, W., Proc. Roy. Soc., *A164*, 176, 1938.  
Hartree, D. R. The Calculations of Atomic Structures. New York, John Wiley and Sons.  
1957.  
Heine, V., Proc. Roy. Soc. (London) *A240*, 340, 354, 361, 1957.  
Heine, V., Aberenkov, I., Phil. Mag., *9*, 451, 1964 (idézve I-gyel).  
Hubbard, J., Proc. Roy. Soc. (London) *A240*, 539, 1957.  
Hubbard, J., Proc. Roy. Soc. (London) *A243*, 336, 1958.  
Jones, H., Handbuch der Physik, XIX. kötet, 227. oldal. Springer Verlag, Berlin. 1956.  
Jones, H., The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals. North-Holland Publ. Co., Amsterdam. 1960.  
Kingston, R. H., Phys. Rev., *84*, 944, 1931.  
Kittel, C., Bevezetés a szilárdtest fizikába. Műszaki Könyvkiadó, Budapest. 1966.  
Kohn, W., Sham, L. J., 1966 (később publikálva).  
Koster G. F., Solid State Physics, *6*, 173, 1957. Academic Press Inc., New York.  
de Launay, J., J. Chem. Phys., *22*, 1676, 1954.  
de Launay, J., Solid State Physics, *2*, 219, 1956.  
Lawson, A. W., Progr. in Metal Phys., *6*, 1, 1956.  
Lin, P. J., Phillips, J. C., Advanc. Phys., *14*, 257, 1965.  
Loucks, T. L., Cutler, P. H., Phys. Rev., *133*, A819, 1964.  
Manning, M. F., Krutter, H. M., Phys. Rev., *51*, 761, 1937.  
Maradudin, A. A., Montroll, E. W., Weiss, G. H., Supplement No. 3. to the Solid State Physics.  
1963.  
Mattheiss, L. F., Phys. Rev., *133*, A1399, 1964.  
McWham, D. B., Jayaraman, A., Phys. Letters, *3*, 129, 1963.  
Messiah, A., Quantum Mechanics' North-Holland Publ. Co., Amsterdam. 1961.  
Pines, D., Solid State Physics, *1*, 367, 1955.  
Pryce, M. H. L., Proc. Phys. Soc. (London) *A63*, 25, 1950.  
Roberts, L. M., Proc. Phys. Soc. (London) *B70*, 738, 1957.  
Schlosser, H., Phys. Chem. Solids, *23*, 963, 1962.  
Schoenflies, A., Theorie der Kristallstruktur. Borntraeger, Berlin. 1923.  
Seitz, F., Zeits. für Krist., *88*, 433, 1934.  
Seitz, F., Ann. of Math., *37*, 17, 1936.  
Seitz, F., Modern Theory of Solids. New York: McGraw—Hill, 1940.  
Sham, L. J., Disszertáció, benyújtva a Cambridge-i egyetemre (publikálatlan). 1963.  
Slater, J. C., Handbuch der Physik, XIX. kötet, Springer Verlag, Berlin. 1958.  
Smithells, C. J., Metals Reference Book. Butterworths Sci. Publ., London 1955.  
Stager, R. A., Drickamer, H. G., Phys. Rev., *131*, 2524, 1963.  
Vasvári, B., Animalu, A. O. E., Heine, V., 1966 (publikálásra beküldve a „Physical Review”-be).  
Vasvári, B., Heine, V., 1966 (publikálásra beküldve a „Philosophical Magazine”-be).  
Wigner, E. P., Seitz, F., Solid State Physics, *1*, 97, 1955.  
Wood, J. H., Phys. Rev., *126*, 517, 1962.  
Ziman, J. M., Electrons and Phonons. Oxford: Clarendon Press. 1960.  
Ziman, J. M., Principles of the Theory of Solids. Cambridge University Press. 1964.







$k = (0,0,0)$ ;  $\Gamma$  pont

$I \Gamma$	$v = \Gamma'_{12}$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$ijj$	311	133	422	511			244	533	622	155
$ijk$					531(1)	531(2)				

$I \Gamma$	$v = \Gamma_{15}$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$iii$	111					222				
$i00$		200					400			
$ii0$			220							
$ijj$				311(1)	311(2)			133(1)	133(2)	
$ij0$										420(1)

 $k = (0,0,0)$ ;  $\Gamma$  pont

$I \Gamma$	$v = \Gamma'_{15}$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$ijk$	531(1)	531(2)	531(3)	642(1)	642(2)	642(3)	731(1)	731(2)	731(3)	751(1)

$I \Gamma$	$v = \Gamma_{25}$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$ii0$	220									
$ij0$		420(1)	420(2)				620(1)	620(2)	640(1)	640(2)
$ijk$				531(1)	531(2)	531(3)				

$I \Gamma$	$v = \Gamma'_{25}$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$iii$	111			222					333	
$ijj$		311(1)	311(2)		133(1)	133(2)	422(1)	422(2)		511(1)

 $k = (0,0,0)$ ;  $\Gamma$  pont

$II \Gamma$	$iii$			
	$\Gamma_1$	$\Gamma'_2$	$\Gamma_{15}$	$\Gamma'_{25}$
$iii$	+	+	+	+
$ii-i$	+	-	+	-
$i-ii$	+	-	+	-
$i-i-i$	+	+	+	+
$-iii$	+	-	-	+
$-ii-i$	+	+	-	-
$-i-ii$	+	+	-	-
$-i-i-i$	+	-	-	+

$II \Gamma$	$i00$		
	$\Gamma_1$	$\Gamma_{12}$	$\Gamma_{15}$
$i00$	+	+	+
$-i00$	+	+	-
$0i0$	+	-	
$0-i0$	+	-	
$00i$	+		
$00-i$	+		

 $k = (0,0,0)$ ;  $\Gamma$  pont

$II \Gamma$	$ii0$				
	$\Gamma_1$	$\Gamma_{12}$	$\Gamma_{15}$	$\Gamma_{25}$	$\Gamma'_{25}$
$ii0$	+		+	+	
$i-i0$	+		+	+	
$-ii0$	+		-	-	
$-i-i0$	+		-	-	
$i0i$	+	+	+	-	
$i0-i$	+	+	+	-	
$-i0i$	+	+	-	+	
$-i0-i$	+	+	-	+	
$0ii$	+	-			+
$0i-i$	+	-			-
$0-ii$	+	-			-
$0-i-i$	+	-			+



$k = (0,0,0)$ ;  $\Gamma$  pont

$II \Gamma$	$ij0$									
	$\Gamma_1$	$\Gamma_2$	$\Gamma_{12}(1)$	$\Gamma_{12}(2)$	$\Gamma_{15}(1)$	$\Gamma_{15}(2)$	$\Gamma'_{15}$	$\Gamma_{25}(1)$	$\Gamma_{25}(2)$	$\Gamma'_{25}$
$ij0$	+	+	2		+				+	
$i-j0$	+	+	2		+				+	
$-ij0$	+	+	2		-				-	
$-i-j0$	+	+	2		-				-	
$i0j$	+	-	+	-	+				-	
$i0-j$	+	-	+	-	+				-	
$-i0j$	+	-	+	-	-				+	
$-i0-j$	+	-	+	-	-				+	
$0ij$	+	+	-	+			+			+
$0i-j$	+	+	-	+			-			-
$0-ij$	+	+	-	+			-			-
$0-i-j$	+	+	-	+			+			+
$ji0$	+	-	-2							
$j-i0$	+	-	-2							
$-ji0$	+	-	-2							
$-j-i0$	+	-	-2							
$j0i$	+	+	-	-		+		+		
$j0-i$	+	+	-	-		-		-		
$-j0i$	+	+	-	-		+		+		
$-j0-i$	+	+	-	-		-		-		
$0ji$	+	-	+	+		+	-	-		+
$0j-i$	+	-	+	+		-	+	+		-
$0-ji$	+	-	+	+		+	+	-		-
$0-j-i$	+	-	+	+		-	-	+		+

 $k = (0,0,0)$ ;  $\Gamma$  pont

$II \Gamma$	$ijj$									
	$\Gamma_1$	$\Gamma'_2$	$\Gamma_{12}$	$\Gamma'_{12}$	$\Gamma_{15}(1)$	$\Gamma_{15}(2)$	$\Gamma'_{15}$	$\Gamma_{25}$	$\Gamma'_{25}(1)$	$\Gamma'_{25}(2)$
$ijj$	+	+	+	+	+				+	
$ij-j$	+	-	+	-	+				-	
$i-ij$	+	-	+	-	+				-	
$i-j-j$	+	+	+	+	+				+	
$-ijj$	+	-	+	-	-				+	
$-ij-j$	+	+	+	+	-				-	
$-i-ij$	+	+	+	+	-				-	
$-i-j-j$	+	-	+	-	-				+	
$jij$	+	+	-	-			-	-		
$ji-j$	+	-	-	+			+	-		
$-jij$	+	-	-	+			-	+		
$-ji-j$	+	+	-	-			+	+		
$j-ij$	+	-	-	+			+	-		
$j-i-j$	+	+	-	-			-	-		
$-j-ij$	+	+	-	-			+	+		
$-j-i-j$	+	-	-	+			-	+		
$jjj$	+	+				+	+	+		+
$j-jj$	+	-				+	-	+		-
$-jjj$	+	-				+	+	-		-
$-j-jj$	+	+				+	-	-		+
$jj-i$	+	-				-	-	+		+
$j-j-i$	+	+				-	+	+		-
$-jj-i$	+	+				-	-	-		-
$-j-j-i$	+	-				-	+	-		+



$k = (0, 0, 0)$ ;  $\Gamma$  pont $\Pi \Gamma$  $ijk$ 

	$\Gamma_1$	$\Gamma_2$	$\Gamma'_1$	$\Gamma'_2$	$\Gamma_{12}(1)$	$\Gamma_{12}(2)$	$\Gamma'_{12}(1)$	$\Gamma'_{12}(2)$	$\Gamma_{15}(1)$	$\Gamma_{15}(2)$	$\Gamma_{15}(3)$	$\Gamma'_{15}(1)$	$\Gamma'_{15}(2)$	$\Gamma'_{15}(3)$	$\Gamma_{25}(1)$	$\Gamma_{25}(2)$	$\Gamma_{25}(3)$	$\Gamma'_{25}(1)$	$\Gamma'_{25}(2)$	$\Gamma'_{25}(3)$
$ijk$	+	+	+	+	2		2		+			+			+			+		
$ij-k$	+	+	-	-	2		-2		+			-			+			-		
$i-jk$	+	+	-	-	2		-2		+			-			+			-		
$i-j-k$	+	+	+	+	2		2		+			+			+			+		
$-ijk$	+	+	-	-	2		-2		-			+			-			+		
$-ij-k$	+	+	+	+	2		2		-			-			-			-		
$-i-jk$	+	+	+	+	2		2		-			-			-			-		
$-i-j-k$	+	+	-	-	2		-2		-			+			-			+		
$ijk$	+	-	-	+	+	-	+	-	+			-			-			+		
$ik-j$	+	-	+	-	+	-	-	+	+			+			-			-		
$i-kj$	+	-	+	-	+	-	-	+	+			+			-			-		
$i-k-j$	+	-	-	+	+	-	+	-	+			-			-			+		
$-ikj$	+	-	+	-	+	-	-	+	-			-			+			+		
$-ik-j$	+	-	-	+	+	-	+	-	-			+			+			-		
$-i-kj$	+	-	-	+	+	-	+	-	-			+			+			-		
$-i-k-j$	+	-	+	-	+	-	-	+	-			-			+			+		
$jki$	+	+	+	+	-	-	-	-		+			+		+				+	
$jk-i$	+	+	-	-	-	-	+	+		-			+		-			+		
$j-ki$	+	+	-	-	-	-	+	+		+			-		+			-		
$i-k-i$	+	+	+	+	-	-	-	-		-			-		-			-		
$-jki$	+	+	-	-	-	-	+	+		+			-		+			-		
$-jk-i$	+	+	+	+	-	-	-	-		-			-		-			-		
$-j-k-i$	+	+	+	+	-	-	-	-		+			+		+			+		
$jik$	+	-	-	+	-2		-2				-				-				+	
$ji-k$	+	-	+	-	-2		2				+				+			-		
$j-ik$	+	-	+	-	-2		2				-				-			+		
$j-i-k$	+	-	-	+	-2		-2				-				+			+		
$-jik$	+	-	+	-	-2		2				+				+			-		
$-ji-k$	+	-	-	+	-2		-2				+				-			-		
$-j-ik$	+	-	-	+	-2		-2				-				+			+		
$-j-i-k$	+	-	+	-	-2		2				-				-			+		
$kji$	+	-	-	+	+	+	+	+		+			-		-				+	
$kj-i$	+	-	+	-	+	+	-	-		-			-		+			+		
$k-ji$	+	-	+	-	+	+	-	-		+			+		+			-		
$k-j-i$	+	-	-	+	+	+	+	+		+			+		+			-		
$k-ji$	+	-	-	+	+	+	-	-		+			+		+			-		
$-kj-i$	+	-	-	+	+	+	+	+		-			+		+			-		
$-k-ji$	+	-	-	+	+	+	+	+		+			-		-			-		
$-k-j-i$	+	-	+	-	+	+	-	-		-			-		+			+		
$kij$	+	+	+	+	-	+	-	+			+			+		+			+	
$ki-j$	+	+	-	-	-	+	+	-			+			-		+		-		
$k-ij$	+	+	-	-	-	+	+	-			-			+		-		-		
$k-i-j$	+	+	+	+	-	+	-	+			-			-		-		-		
$-kij$	+	+	-	-	-	+	+	-			+			-		+		-		
$-ki-j$	+	+	+	+	-	+	-	+			+			+		+		+		
$-k-ij$	+	+	+	+	-	+	-	+			-			-		-		-		
$-k-i-j$	+	+	-	-	-	+	+	-			-			+		-		+		



$k = (1, 0, 0)$ ;  $X$  pont

$I \ X$		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = X_1$	$i00$	100					300				
	$0ii$		011								140
	$ij0$			120					320		
	$0ij$				211	122		013			
	$ijk$									231	
$v = X_2$	$ij0$	120		320		140		340			520
	$0ij$		013		231		124		431	015	
	$ijk$										
$v = X_3$	$0ii$	011			013			033			
	$0ij$		211	122			322		411		233
	$ijk$					231				124	
$v = X_4$	$0ij$	013				015			035		
	$ijk$		231	124	431		324	251		253	162
$v = X'_1$	$ijk$	231	124	431	324	251	253	162	451	542	362
$v = X'_2$	$ijj$	211	122		322	411		233			
	$ijk$			231			124		431	324	251
$v = X'_3$	$ij0$	120	320		140		340		520		
	$ijk$			231		124		431		324	251
$v = X'_4$	$i00$	100			300						
	$ij0$		120				320		140		
	$ijk$			211		122		231		322	411
$v = X_5$	$ijj$	211	122			322	411			233	
	$ijk$			231 (1)	231 (2)			124 (1)	124 (2)		431 (1)
$v = X'_5$	$ij0$	120				320			140		
	$0ij$		211	122	013						
	$ijk$						231	322		411	
	$ijk$										124

 $k = (1, 0, 0)$ ;  $X$  pont

$II \ X$	$X_1$	$X'_4$
$i00$	+	+
$-i00$	+	-

$II \ X$	$0ii$	$X_1$	$X_3$	$X_5$
$0ii$		+	+	+
$0i-i$		+	-	+
$0-ii$		+	-	-
$0-i-i$		+	+	-

$II \ X$	$ij0$	$X_1$	$X_2$	$X'_3$	$X'_4$	$X_5$	$X'_5$
$0ij$		+	+	+	+		+
$i-j0$		+	+	+	+		-
$-ij0$		+	+	+			+
$-i-j0$		+	+	-	-		-
$i0j$		+	-	-	+	+	
$i0-j$		+	-	-	+	-	
$-i0j$		+	-	+	-	-	
$-i0-j$		+	-	+	-	+	



$k = (1, 0, 0)$ ;  $X$  pont

$II\ X$		$0ij$					$II\ X$		$ijj$					
		$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	$X'_5$			$X_1$	$X_3$	$X'_2$	$X'_4$	$X_5$	$X_5$
$0ij$		+	+	+	+	+	$ijj$		+	+	+	+	+	+
$0i-j$		+	+	-	-	+	$ij-j$		+	-	-	+	-	+
$0-i-j$		+	+	-	-	-	$i-jj$		+	-	-	+	+	-
$0-i-j$		+	+	+	+	-	$i-j-j$		+	+	+	+	-	-
$0ij$		+	-	+	-		$-ijj$		+	+	-	-	-	+
$0j-i$		+	-	-	+		$-ij-j$		+	-	+	-	+	+
$0-ji$		+	-	-	+		$-i-jj$		+	-	+	-	-	-
$0-j-i$		+	-	+	-		$-i-j-j$		+	+	-	-	+	-

 $k = (1, 0, 0)$ ;  $X$  pont

$II\ X$	$ijk$											
	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	$X'_1$	$X'_2$	$X'_3$	$X'_4$	$X_5(1)$	$X_5(2)$	$X'_5(1)$	$X'_5(2)$
$ijk$	+	+	+	-	+	+	+	+	+		+	
$ij-k$	+	+	-	+	-	-	+	+	-		+	
$i-jk$	+	+	-	+	-	-	+	+	+		-	
$i-j-k$	+	+	+	-	+	+	+	+	-		-	
$-ijk$	+	+	+	-	-	-	-	-	-		+	
$-ij-k$	+	+	-	+	+	+	-	-	+		+	
$-i-jk$	+	+	-	+	+	+	-	-	-		-	
$-i-j-k$	+	+	+	-	-	-	-	-	+		-	
$ikj$	+	-	+	+	-	+	-	+		+		+
$ik-j$	+	-	-	-	+	-	-	+		+		-
$i-kj$	+	-	-	-	+	-	-	+		-		+
$i-k-j$	+	-	+	+	-	+	-	+		-		-
$-ikj$	+	-	+	+	+	-	+	-		-		+
$-ik-j$	+	-	-	-	-	+	+	-		-		-
$-i-kj$	+	-	-	-	-	+	+	-		+		+
$-i-k-j$	+	-	+	+	+	-	+	-		+		-

 $k = \frac{1}{2}(1, 1, 1)$ ;  $L$  pont

$I\ L$		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = L_1$	$iii$	111			333						
	$ijj$		-311	-133		511		-533	155	711	
	$ijk$						15-3				73-1
$v = L_2$	$ijk$	15-3	73-1	-751	7-53	-931	951	953	9-71	113-1	9-75
$v = L'_1$	$ijk$	15-3	73-1	-751	7-53	-931	951	953	9-71	112-1	9-75
$v = L'_2$	$ijj$	-311	-133	511		-533	155	-711		-355	733
	$ijk$				15-3				73-1		
$v = L_3$	$ijj$	-311	-133	511			-533	155	-711		
	$ijk$				15-3(1)	15-3(2)				73-1(1)	73-1(2)
$v = L'_3$	$ijj$	-311	-133	511			-533	155	-711		
	$ijk$				15-3(1)	15-3(2)				73-1(1)	73-1(2)

A táblázatban szereplő számhármassok a tényleges értékeknek kétszeresei. Valójában tehát az egyes  $i, j, k$  értékeket akkor kapjuk meg, ha a megadottakat 2-vel még elosztjuk. Pl.  $v = L_1$ -re  $ijk$ -nál a 6. oszlopban  $(ijk) = \left(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{-3}{2}\right)$ , stb.







$$\underline{k} = \left(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right); \quad U\text{-pont}$$

IU

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v=U_1$	0ii		0-3'-3'		05'5'					0-11'-3'	0-11'5'
	0ij			0-3'5'			2-3'-3'		25'5'		
	ijj	11'1'				1-7'1'		2-3'5'			
	ijk										
$v=U_2$	ijk	1-7'1'	2-3'5'	2-3'-11'	2-3'-11'	23'-11'	23'11'	4-3'5'	4-11'-3'	4-11'5'	413'-3'
$v=U_3$	ijj	11'1'	2-3'-3'			25'5'	31'1'				
	ijk			1-7'1'	25'-3'			2-3'-11'	2-3'13'	2-11'5'	25'13'
$v=U_4$	0ij		05'-3'		0-11'-3'	013'-3'	0-11'5'	013'5'			
	ijk	17'1'		25'-3'					2-3'-11'	2-3'13'	25'-11'

Jelölések, mint K-nál.

II U	II U 0ij	II U ijj	II U ijk
<u>U<sub>1</sub></u>	<u>U<sub>1</sub> U<sub>4</sub></u>	<u>U<sub>1</sub> U<sub>3</sub></u>	<u>U<sub>1</sub> U<sub>2</sub> U<sub>3</sub> U<sub>4</sub></u>
0ii   +	0ij   + +	ijj   + +	ijk   + + + +
	0ji   + -	-ijj   + -	ikj   + - + -
			-ijk   + - - +
			-ikj   + + - -

$$\underline{k} = \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right); \quad K \text{ pont}$$

IK

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v=K_1$	ii0	3'3'0		-5'-5'0	-5'-5'0						
	ij0			-5'3'0							
	ijj		-1'-1'1				3'3'2			7'7'1	-5'-5'2
	ijk					7'-1'1		-5'3'2	-9'-1'1		
$v=K_2$	ijk	7'-1'1	-5'3'2	-9'-1'1	-9'7'1	7'-1'3	11'-3'2	11'-5'2	-9'-1'3	15'-1'1	-13'3'2
$v=K_3$	ijj	-1'-1'1		3'3'2			7'7'1	-5'-5'2		-1'-1'3	-9'-9'1
	ijk		7'-1'1		-5'3'2	-9'-1'1			-9'7'1		
$v=K_4$	ij0				11'3'0	11'5'0	-13'3'0	-13'-5'0			
	ijk	7'-1'1	-5'3'2	-9'-1'1					7'-1'3	11'3'2	11'-5'2

Jelölések:  $x' = \frac{x}{4}$  (pl.:  $7' = \frac{7}{4}$ )

II K	II K ij0	II K iij	II K ijk
<u>K<sub>1</sub></u>	<u>K<sub>1</sub> K<sub>4</sub></u>	<u>K<sub>1</sub> K<sub>3</sub></u>	<u>K<sub>1</sub> K<sub>2</sub> K<sub>3</sub> K<sub>4</sub></u>
ii0   +	ij0   + +	ijj   + +	ijk   + + + +
	ji0   + -	ii-j   + -	ij-k   + - - +
			jik   + - + -
			ji-k   + + - -



$I \Delta$ A  $\Delta$ -tengely  $k=(m, 0, 0) \quad 0 < m < 1$ 

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v=\Delta_1$	$i00$ $ij0$ $ijj$ $ijk$	0'00	-1'11	1'11	0'20	2'00	-2'00	0'22	2'20	-2'20	1'31
$v=\Delta_2$	$ij0$ $ijk$	0'20	2'20	-2'20	1'31	-1'31	3'31	-3'31	4'20	-4'20	0'42
$v=\Delta_1'$	$ijk$	1'31	-1'31	3'31	-3'31	0'42	2'42	-2'42	1'51	-1'51	-1'53
$v=\Delta_2'$	$ijj$ $ijk$	1'11	-1'11	0'22	3'11	-3'11	1'31	-1'31	1'33	-1'33	-2'22
$v=\Delta_e$	$ij0$ $ijj$ $ijk$	1'11	-1'11	0'20	2'20	-2'20	0'22	1'31(1)	-1'31(2)	1'31(2)	-1'31(1)

Jelölések:  $x' = x + m$ ;  $-x' = -x + m$  pl.  $1' = 1 + m$ ;  $-2' = -2 + m$  stb.A  $\Delta$ -tengely,  $k=(m, 0, 0) \quad 0 < m < 1$ 

$II \Delta$	$II \Delta$	$ij0$	$II \Delta$	$ijj$	$II \Delta$	$ijk$
	$\Delta_1$	$\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3(1)$		$\Delta_1 \Delta'_2 \Delta_3(2)$		$\Delta_1 \Delta_2 \Delta'_1 \Delta'_2 \Delta_3(1) \Delta_3(2)$
$i00$ +	$ij0$ $i-j0$ $i0j$ $i0-j$	$+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $-$ $+$ $-$ $+$ $-$	$ijj$ $ij-j$ $i-jj$ $i-j-j$	$+$ $+$ $+$ $+$ $-$ $+$ $+$ $-$ $-$ $+$ $+$ $-$	$ijk$ $ij-k$ $i-jk$ $i-j-k$ $ikj$ $ik-j$ $i-kj$ $i-k-j$	$+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $-$ $-$ $+$ $+$ $+$ $-$ $-$ $-$ $+$ $+$ $+$ $+$ $-$ $+$ $-$ $-$ $+$ $+$ $+$ $-$ $+$ $-$ $+$ $+$ $-$ $+$ $-$ $-$ $+$ $-$ $-$ $+$ $-$

 $I \Delta$  A-tengely:  $(m, m, m) \quad 0 < m < \frac{1}{2}$ 

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = \Delta_1$	$iii$ $ijj$ $ijk$	$0'0'0'$	$-1'-1'-1'$	$1'-1'-1'$	$-1'1'1'$	$1'1'1'$	$2'0'0'$	$-2'0'0'$	$0'2'2'$	$0'-2'-2'$	$2'-2'0'$
$v = \Delta_2$	$ijk$	$2'-2'0'$	$-3'-1'1'$	$3'-1'1'$	$3'-3'1'$	$-3'3'-1'$	$4'2'0'$	$-4'2'0'$	$4'-2'0'$	$-4'-2'0'$	$4'-2'2'$
$v = \Delta_3$	$ijj$ $ijk$	$-1'1'1'$	$1'-1'-1'$	$2'0'0'$	$-2'0'0'$	$0'2'2'$	$0'-2'-2'$	$2'-2'0'(1)$	$2'-2'0'(1)$	$3'-1'1'(1)$	$3'-1'1'(2)$

Jelölések, mint  $\Delta$ -nál.

$II \Delta$	$II \Delta$	$ijj$	$II \Delta$	$ijk$
	$\Delta_1$	$\Delta_1 \Delta_3(1)$		$\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3(1) \Delta_3(2)$
$iii$ +	$ijj$ $jij$ $iji$	$+$ $+$ $+$ $-$ $+$	$ijk$ $jki$ $kij$ $ikj$ $jik$ $kji$	$+$ $+$ $2$ $+$ $+$ $-$ $+$ $+$ $-$ $+$ $+$ $-$ $+$ $+$ $-$ $-2$ $-$ $+$ $-$ $+$ $+$



$$Z\text{-tengely: } (m, 1, 0) \quad 0 < m < \frac{1}{2}$$

 $I Z$ 

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = Z_1$	$ij0$ $i0j$ $ijk$	0'10	1'01	-1'01	2'10	-2'10					
							0'12	1'21	-1'21	2'12	-2'12
$v = Z_2$	$ijk$	0'12	1'21	-1'21	2'12	-2'12	3'21	-3'21	1'23	-1'23	-2'32
$v = Z_3$	$ij0$ $ijk$	0'10	2'10						0'30	2'30	-2'30
				0'12	1'21	-1'21	2'12	-2'12			
$v = Z_4$	$i0j$ $ijk$	1'01	-1'01						3'01	-3'01	1'03
				0'12	1'21	-1'21	2'12	-242			

Jelölések, mint  $\Delta$ -nál.

$II Z$	$ij0$	$II Z$	$i0j$	$II Z$	$ijk$
	$Z_1 Z_3$		$Z_1 Z_4$		$Z_1 Z_2 Z_3 Z_4$
$ij0$	+	+			
$i-j0$	+	-			
$i0j$			+	+	
$i0-j$			+	-	
$ijk$					+
$ij-k$					+
$i-jk$					+
$i-j-k$					+

$$Q\text{-tengely} \quad \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - m, \frac{1}{2} + m \right) \quad 0 < m < \frac{1}{2}$$

 $I Q$ 

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = Q_1$	$ijk$	$11^- 1^+$	$-31^- 1^+$	$1-3^- 1^+$	$11^- -3^+$	$-3-3^- 1^+$	$-31^- -3^+$	$1-3^- -3^+$	$33^- 3^+$	$51^- 1^+$	$15^- 1^+$
$v = Q_2$	$ijk$	$11^- 1^+$	$-31^- 1^+$	$1-3^- 1^+$	$11^- -3^+$	$-3-3^- 1^+$	$-3-3^- 1^+$	$1-3^- -3^+$	$33^- 3^+$	$51^- 1^+$	$15^- 1^+$

Jelölések:  $|x^- = |x-m \quad -|x^- = -|x-m \quad |x^+ = |x+m \quad -|x^+ = -|x+m \quad |x = \frac{x}{2} \quad \text{pl.: } -3^- = -\frac{3}{2} - m^-$

$II Q$	
	$Q_1 Q_2$
$ijk$	+
$-i-j-j$	+



$$S\text{-tengely} \quad \underline{k} = (1, m, m) \quad 0 < m < \frac{1}{4}$$

*IS*

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v=S_1$	$\begin{smallmatrix} 0ii \\ 0ij \\ ijj \\ ijk \end{smallmatrix}$	$10'0$	$0-1'-1'$	$0-1'1'$	$01'1'$						
					$1-2'0'$	$12'0'$	$2-1'1'$		$21'1'$		
								$2-1'1'$		$0-3'-1'$	$03'-1'$
$v=S_2$	$ijk$	$1-2'0'$	$12'0'$	$2-1'1'$	$2-1'-3'$	$2-1'3'$	$21'-3'$	$21'3'$	$4-1'1'$	$4-3'-1'$	$4-3'1'$
$v=S_3$	$\begin{smallmatrix} ijj \\ ijk \end{smallmatrix}$	$10'0'$	$2-1'-1'$			$21'1'$					
				$1-2'0'$	$12'0'$		$21'-1'$	$30'0'$			
									$2-1'-3'$	$2-1'3'$	$2-3'1'$
$v=S_4$	$\begin{smallmatrix} 0ij \\ ijk \end{smallmatrix}$	$01'-1'$				$0-3'-1'$	$03'-1'$	$0-3'1'$	$03'1'$		
			$1-2'0'$	$12'0'$	$21'-1'$					$2-1'3'$	$2-1'3'$

Jelölések, mint a *A*-nál.

<i>HS</i>		<i>HS</i>	$0ij$	<i>HS</i>	$ijj$	<i>HS</i>	$ijk$
	$S_1$		$S_1 \ S_4$		$S_1 \ S_3$		$S_1 \ S_2 \ S_3 \ S_4$
$0ii$	+	$0ij$	++	$ijj$	++	$ijk$	++ ++
		$0ji$	+-	$-ijj$	+-	$ikj$	+- +-
						$-ijk$	+- -+
						$-ikj$	++ --

$$K'\text{-tengely} \quad \left(1-m, \frac{1}{2}+m, 0\right) \quad 0 < m < \frac{1}{4}$$

*IK'*

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v=K'_1$	$ij0$	$1-\underline{1}+0$					$1-\underline{3}+0$	$1-\underline{5}+0$	$-1-\underline{1}+0$	$3-\underline{1}+0$	
	$ijk$		$-m\underline{3}+1$	$-m-\underline{1}+1$	$2-\underline{1}+1$	$2-\underline{3}+1$					$1-\underline{1}+2$
$v=K'_2$	$ijk$	$-m\underline{3}+1$	$-m\underline{1}+1$	$2-\underline{1}+1$	$2-\underline{3}+1$	$1-\underline{1}+2$	$3-\underline{1}+2$	$-1-\underline{1}+2$	$1-\underline{5}+2$	$1-\underline{3}+2$	$-1-\underline{3}+2$

Jelölések, mint *Q*-nál.*IK'*

	$K'_1 \ K'_2$
$ij0$	+
$ijk$	++
$ij-k$	+-



$\Sigma$ -tengely  $|k=(m, m, 0)$   $0 < m < 1$  $I \Sigma$ 

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = \Sigma_1$	$ii0$ $ij0$ $ijk$	$0'0'0$				$2'0'0$	$-2'0'0$				$2'-2'0$
			$1'1'1$		$-1'-1'1$			$0'0'2$			
				$-1'1'1$					$0'-2'2$	$0'2'2$	
$v = \Sigma_2$	$ijk$	$1'-1'1$	$0'2'2$	$0'-2'2$	$3'1'1$	$3'-1'1$	$-3'-1'1$	$-3'-1'1$	$3'-3'1$	$-1'3'3$	$-1'-3'3$
$v = \Sigma_3$	$ijj$ $ijk$	$1'1'1$	$-1'-1'1$		$0'0'2$						
				$1'-1'1$		$0'2'2$	$0'-2'2$	$3'-1'1$	$-1'3'1$	$-3'1'1$	$3'1'1$
$v = \Sigma_4$	$ij0$ $ijk$		$2'0'0$	$-2'0'0$			$2'-2'0$				
		$1'-1'1$			$0'2'2$	$0'-2'2$		$-3'-1'1$	$-3'1'1$	$3'-1'1$	$3'1'1$

Jelölések, mint  $A$ -nál.

$II \Sigma$		$II \Sigma \quad iij$		$II \Sigma \quad ij0$		$II \Sigma \quad ijk$						
$\Sigma_1$		$\Sigma_1 \Sigma_3$		$\Sigma_1 \Sigma_4$		$\Sigma_1 \Sigma_2 \Sigma_3 \Sigma_4$						
$ii0$	+	$iij$	+	+	$ij0$	+	+	$ijk$	+	+	+	+
		$ii-j$	+	-	$ji0$	+	-	$ij-k$	+	-	-	+
								$ikj$	+	-	+	-
								$ik-j$	+	+	-	-

 $X$  pont — a négyzetes lap általános helyzetű pontja:  $(l, m, n)$ 

$$0 < m, n < \frac{1}{2}$$

 $I X$ 

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = \bar{X}_1$	$0ij$		$0-1'-1''$	$0-1'1''$	$01'-1''$	$01'1''$					
	$ijk$	$lmn$					$2-1'1''$	$21'-1''$	$2-1'-1''$	$21'1''$	$1-2'm$
$v = \bar{X}_2$	$ijk$	$lmn$	$2-1'1''$	$21'-1''$	$2-1'1''$	$21'1''$	$1-2'm$	$lm-2'$	$12'n$	$lm2''$	$-1-2'-2''$

Jelölések:  $x' = x + m$   $-x' = -x + m$   $x'' = x + n$   $-x'' = -x + n$  $II X$ 

	$0ij$	$ijk$	$-ijk$
$\bar{X}_1$	+	+	+
$\bar{X}_2$		+	-



$$V\text{-pont} \quad \left( \frac{1}{2} - m, \frac{1}{2} + 2m, \frac{1}{2} - m \right) \quad 0 < m < \frac{1}{4}$$

IV

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = V_1$	$iji$	$\underline{1^-} \underline{1'1^-}$	$\underline{1^-} \underline{1'1^-}$		$\underline{1^-} \underline{3'1^-}$		$\underline{1^-} \underline{3'1^-}$		$\underline{3^-} \underline{1'3^-}$		$\underline{3^-} \underline{1'3^-}$
	$ijk$			$\underline{1^-} \underline{1'3^-}$		$\underline{3^-} \underline{1'1^-}$		$\underline{1^-} \underline{3'3^-}$		$\underline{3^-} \underline{3'1^-}$	
$v = V_2$	$ijk$	$\underline{1^-} \underline{1'3^-}$	$\underline{3^-} \underline{1'1^-}$	$\underline{1^-} \underline{3'3^-}$	$\underline{3^-} \underline{3'1^-}$	$\underline{5^-} \underline{1'1^-}$	$\underline{1^-} \underline{5'1^-}$	$\underline{5^-} \underline{3'1^-}$	$\underline{3^-} \underline{5'1^-}$	$\underline{5^-} \underline{1'3^-}$	$\underline{5^-} \underline{1'5^-}$

Jelölések:  $|x^- = |x - m$   $-|x^- = -|x - m$   $|x^+ = |x + m$   $-|x^+ = -|x + m$   $|x' = |x + 2m$   $-|x' = -|x + 2m$ 

$$|x = \frac{x}{2} \quad \text{pl.:} \quad -|3' = -\frac{3}{2} + 2m \quad |1^- = \frac{1}{2} - m \quad \text{stb.}$$

II V

	$iji$	$ijk$	$kji$
$V_1$	+	+	+
$V_2$		+	-

$$B \text{ pont} \quad \left( \frac{1}{2} + m, \frac{1}{2} + m, \frac{1}{2} - 2m \right) \quad 0 < m < \frac{1}{4}$$

I B

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = B_1$	$ijj$	$\underline{1^+} \underline{1^+} \underline{1''}$	$\underline{1^+} \underline{1^+} \underline{1''}$	$\underline{1^+} \underline{1^+} \underline{3''}$			$\underline{1^+} \underline{1^+} \underline{3''}$			$\underline{3^+} \underline{3^+} \underline{1''}$	
	$ijk$				$\underline{3^+} \underline{1^+} \underline{1''}$	$\underline{3^+} \underline{1^+} \underline{1''}$		$\underline{1^+} \underline{3^+} \underline{3''}$			$\underline{3^+} \underline{1^+} \underline{3''}$
$v = B_2$	$ijk$	$\underline{3^+} \underline{1^+} \underline{1''}$	$\underline{3^+} \underline{1^+} \underline{1''}$	$\underline{1^+} \underline{3^+} \underline{3''}$		$\underline{3^+} \underline{1^+} \underline{3''}$	$\underline{5^+} \underline{1^+} \underline{1''}$	$\underline{5^+} \underline{3^+} \underline{1''}$	$\underline{3^+} \underline{1^+} \underline{5''}$	$\underline{5^+} \underline{1^+} \underline{3''}$	$\underline{5^+} \underline{1^+} \underline{5''}$

Jelölések; mint V-nél;  $|x'' = |x - 2m$   $-|x'' = -|x - 2m$ 

II B

	$ijj$	$ijk$	$jik$
$B_1$	+	+	+
$B_2$		+	-

Általános helyzetű pont ( $ijk$ )

I-A

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$v = A$	$ijk$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{1'1''1''''}$	$\underline{2'jk}$

Jelölések:  $x' = x + i$ ;  $x'' = x + j$ ;  $x''' = x + k$ ;  $-x' = -x + i$ ;  $-x'' = -x + j$ ;  $-x''' = -x + k$



# NEM-VALENCIA-KÖLCÖNHATÁSOK\*

C. A. COULSON

Mathematical Institute, Oxford

A mű áttekintést ad a kémiai kölcsönhatásban szerepet játszó nem-valencia erőkről. Ezek között találhatók: a kölcsönható anyagfajták rögzített töltéseloszlásai közötti tisztán elektrosztatikus erők; a kicserélődésből származó taszító erők és az áthatásból származó vonzóerők, amikor a két töltésfelhő között átfedés következik be; továbbá London-típusú diszperziós erők. Mindezen erőtipusok általános jellemvonásait tárgyalja kvantummechanikai szempontból, különös tekintettel az atom vagy atomcsoport van der Waals-rádiuszának jelentőségére; ezen erők lokális additivitásának fokára; az atom relatív keménységére vagy lágyágára, és azon belső molekuláris deformáció-típusokra, melyek egy formálisan „túlzsúfolt” molekulában várhatók. Kimutatja, hogy léteznek vonzó és taszító háromtest-erők, általában azonban ezek nem jelentősek, kivéve olyan kicsiny rendszereket, mint a nemesgáz-atomoké. Nem erősen poláros molekulák elhelyezkedése molekulakristály képződésekor főleg két tényezőtől függ: a kötést szolgáltató diszperziós energiától, és a pontos orientációt megszabó kicserélődési taszítástól. Kimutatható, hogy sok biológiaiilag fontos molekulának, például a polipeptideknek, a lehetséges konformációit élesen meghatározzák a rövid hatótávolságú taszító erők, s e konformációkat gyakran nagy pontossággal előre lehet jelezni. Kíváncsok jobb számítások a diszperziós erőre vonatkozólag.

## 1. Valencia- és nem-valencia-erők

Ha két atom közötti vonzás stabil molekulát eredményez, akkor kémiai kötés kialakulásáról beszélünk. Az ebben a folyamatban szerepet játszó erőket valencia-erőknek nevezzük. Ezek egymáshoz közeli atomok között hatnak, és jólismert jellemvonásokkal rendelkeznek. Az utóbbi 40 év folyamán a hullámmechanikának a molekulaszervezetre történő alkalmazása lehetővé tette, hogy megismerjük ezt a jelenséget. Heitler, London, Hund, Hückel, Mulliken, Slater, Pauling, Lennard—Jones és mások munkásságának eredményeként jól használható nyelv teremtődött meg a kémiai kötés leírására. Beszélhetünk például elektronpár-képződésről, a kötésért elsősorban felelős két elektron spin-csatolásáról, kovalens és ionos karakterről, hibridizációról és rezonanciáról,  $\pi$ -elektronokról és  $\sigma$ -elektronokról, elektronkorrelációról, atomi töltésekről és kötésrendekről, stb. Még igen nagy nehézségekkel jár a kötés-tulajdonságok kiszámítása nagy elektronikus számológépek segítségével: de tudjuk, mit kell tennünk, ha egy ilyen számítást szándékszunk véghezvinni, és fogalmaink eléggé világosak ahhoz, hogy megértsük a kémiai viselkedés összes fő típusait, beleértve a sugárzás abszorpcióját és emisszióját is. Ilyen értelemben mondhatjuk, hogy *értjük* a valenciaerőket.

\* Az 1967 szeptemberében Debrecenben és a Balatonnál megrendezett Kvantumkémiai Nyári Iskolán elhangzott előadássorozat anyaga. Az itt közölt anyag egy részét a szerző Nem-valencia kölcsönhatások c. könyve tartalmazni fogja, melyet a Polytechnic Press (Brooklyn Polytechnic Institute, New York, USA) rövidesen közölni fog. Felhasználta továbbá a szerző az Industrie Chimique Belge-ben (1963, 2. sz., 149. o.) közölt cikkét is.



Van azonban sok egyéb erőtípus, amely szintén fontos a kémiai viselkedés szempontjából. Ezek a nem-valencia-erőknek nevezhető kölcsönhatások. Ha ugyanúgy akarjuk ezeket is érteni, ahogyan értjük a valenciaerőket, előbb megfelelő nyelvet kell kidolgozni, s egy sor alkalmas fogalmat bevezetni. E cikk célja az, hogy ilyen fogalmakat elemezzen, és különböző utakat világítson meg, melyeken azok kísérleti mérésekkel kapcsolhatók össze. Azt fogjuk találni, hogy ezen a területen a helyzet sokkal kevésbé átértett, mint a valenciaerők tárgyalásakor. Pontos számítások nem egykönnyen lehetségesek, kivéve olyan egyszerű rendszerek kölcsönhatásait, mint a nemesgáz-atomoké, amelyek nem valami nagy jelentőségűek kémiai szempontból.

Tennünk kell egy előzetes megjegyzést. Beszélni fogunk valencia- és nem-valencia-erőkről, s mindkettőt olyan különböző tényezőkkel fejezzük ki, amelyek ezekhez hozzájárulást adnak. Ténylegesen azonban két adott, *A* és *B* rendszer között csak egyetlen erő hat. Bizonyos körülmények között ez az erő kísérletileg mérhető. Azonban ennek az erőnek a komponensei, melyeket valencia- és nem-valencia-erőkként tüntettünk fel, kísérletileg nem mérhetők. Ez azt jelenti, hogy végeredményben a teljes erő mindenfajta részekre bontása tetszés szerinti, s bizonyosan nem egyedülálló. Mindazonáltal az ilyen felbontás számunkra igen előnyösen használható lehet; ez adja jogosultságát. Használhatósága két szempontból ered: egyrészt lehetővé teszi számunkra olyan molekuláris tulajdonságok számítását, mint a konformáció és a spektrumok, melyeket össze lehet hasonlítani a tapasztalattal, vagy további tanulmányokhoz szolgálhatnak útmutatóul; másrészt ez a szeparáció betekintést enged a kémiai viselkedés okaiba. Ha fogalmainkat jól választottuk meg, a kémiának ezen sajátos ága, mint látni fogjuk, illeszkedni fog a kémia nagyobb rendszerébe. A nem-valencia-erőket az anyag viselkedésének egy adott részeként tarthatjuk számon.

## 2. A nem-valencia-erők szerepe

A nem-valencia-erők között vannak rövid és hosszú hatótávolságúak. A rövid hatótávolságú erők rendszerint taszítóak, a hosszú hatótávolságúak többnyire — de nem mindig — vonzóak. Például, ha két hélium-atom szorosan egymás mellé kerül, akkor taszítják egymást. Nagy távolság esetén azonban vonzzák egymást, s így bizonyos körülmények között kis számú  $\text{He}_2$  molekula van egyensúlyban az egyatomos He-gázzal.

A nem-valencia-erők továbbá hathatnak a molekulán belül (intramolekulárisan), és azon kívül is, a molekulák között (intermolekulárisan). Egy adott gáz állapotegyenlete szempontjából, vagy egy molekulakristály szerkezetének részletes formáját illetően meghatározó jellegűek. Azonkívül ezek az erők nem csupán kéttest-erők lehetnek, bár a legtöbb állapotban a kéttest-erők sokkal erősebbek a többtest-erőknél; hanem valószínű, hogy a nemesgáz-atomok kristályszerkezetét nagy mértékben determinálják a háromtest-erők, melyek akkor lépnek fel, ha három ilyen atom kerül közel egymáshoz; s utóbbiak kétségtelenül egy folyadék részletes szerkezetét és mikro-viselkedését is erősen befolyásolják.

A nem-valenciaerők három fő típusát különböztethetjük meg:

- {1} tisztán elektrosztatikus erők;
- {2} kicserélődési erők;
- {3} diszperziós erők.



Van azonban még sok egyéb erőfajta; ezek nagyságra nézve sokkal kisebbek, és a spin-spin és spin-pálya kölcsönhatásoktól függnék. Ezeknek egy  $\alpha^n$  szorzótényezősége van, ahol  $n \geq 2$ ,  $\alpha$  pedig a finomstruktúra-állandó  $\left(\alpha = \frac{2\pi e^2}{hc} = \frac{1}{137}\right)$ , ezért ezek túl kicsinyek ahhoz, hogy diszkussziókat jelentősen befolyásolják [1].

### 3. Tisztán elektrosztatikus erők

Érdekes felidézni az erők három fő típusának ({1}—{3}) nagyságrendjét a tekintett atomok, illetve molekulák közötti  $R$  távolsággal kifejezve. Így az {1} tisztán elektrosztatikus erő úgy tekinthető, hogy az a tiszta töltések, dipólok, kvadrupólok és magasabb momentumú multipólok kölcsönhatásából származik.

A töltés-töltés között ható erőkhöz  $1/R$ -rel változó energia tartozik.

A töltés-rögzített dipól között ható erőkhöz  $1/R^2$ -tel változó energia tartozik.

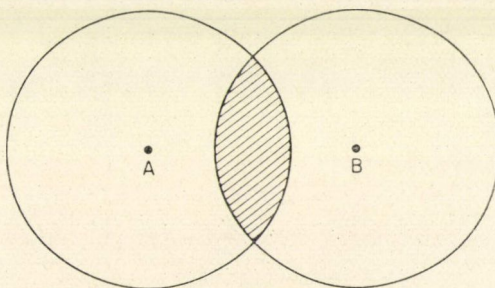
A dipól-dipól között ható erőkhöz  $1/R^3$ -nel változó energia tartozik.

A dipólok és multipólok orientációjától függően, ezek az erők lehetnek mind vonzóak, mind taszítóak. Ha azonban a molekulák szabadon foroghatnak, és relatív orientációjukat egy Boltzmann-faktor szabja meg, akkor  $T$  hőmérsékleten a töltés-forgó dipól-energia  $1/R^4 kT$ -vel, a dipól-dipól energia pedig  $1/R^6 kT$ -vel változik. Hasonló helyzet áll elő két,  $\mu_1$  és  $\mu_2$  permanens momentummal, valamint  $\alpha_1$  és  $\alpha_2$  — egyszerűség kedvéért izotrópnak feltételezett — polarizálhatósággal rendelkező molekula kölcsönhatásakor. A  $\mu_1$  momentumú dipól  $\mu_1/R^3$  nagyságrendű teret hoz létre a második molekulánál, így egy  $\alpha_2 \mu_1/R^3$ -nel arányos indukált dipól és  $\alpha_2 \mu_1^2/R^6$ -nal arányos energia adódik. Természetesen fellép egy  $\alpha_1 \mu_2^2/R^6$ -nal arányos energia is, mely az első molekulának a második tere által indukált polarizációjával kapcsolatos. Ezekből az energiákból, átlagolva az összes irányra, egy  $(\alpha_2 \mu_1^2 + \alpha_1 \mu_2^2)/R^6$ -nal arányos, hőmérsékletfüggő indukciós energiát kapunk. A direkt dipól-dipól energia azonban  $\mu_1 \mu_2/R^3$ -nel arányos, s ennek szögtől függő tényezője olyan, hogy szükségünk van a Boltzmann-faktorra ahhoz, hogy zérustól különböző energiát kapjunk. Ebben az esetben az energia  $\mu_1^2 \mu_2^2/R^6 kT$ -vel arányos. Magasabb multipólok  $1/R$ -nek magasabb hatványaihoz vezetnek; azonban, mint később látni fogjuk, a kvadrupól-kölcsönhatások nagy jelentőségűek a nem-poláris molekulák kristályszerkezetében.

### 4. Kicserélődési erők

A {2} kicserélődési erők akkor lépnek fel, ha két elektronnak — melyek spinjei már előzőleg valencia-erőkkel csatolódtak más elektronokhoz — a töltésfelhői átfedésbe kerülnek. Erre a legegyszerűbb példa: két hélium-atom példája (1. ábra); az

átfedési tartományt vonalkázással jelöltük. Ebben a tartományban túl sok elektron van az alacsonyan fekvő energiaállapotokban, s így a Pauli-féle kizárási elv értelmében magasabb szintekre való „lokális gerjesztésnek” kell bekövetkeznie, amely



1. ábra. A két atomi töltésfelhő átfedése  
He...He kölcsönhatás esetén



energianövekedéssel jár; ez taszítást eredményez. Ezen állapot leírásának másik módja: azt mondjuk, hogy az  $A$  és  $B$  rendszer azonos spinű elektronjaihoz tartozó  $\Phi_a$  és  $\Phi_b$  atomi pályák nem alkotnak ortogonális pályákat. Ha ezeket szimmetrikusan ortogonalizáljuk, akkor  $\Phi_a$ -t és  $\Phi_b$ -t  $(\Phi_a - \lambda \Phi_b)$ -vel és  $(\Phi_b - \lambda \Phi_a)$ -val helyettesítjük, ahol fennáll, hogy  $S(1 + \lambda^2) = 2\lambda$ , ha  $\int \Phi_a \Phi_b d\tau = S$  az átfedési integrál. Mivel  $S$  feltevésünk szerint pozitív kell legyen, ez töltést távolít el a magok közötti tartományból, és így, a Hellmann—Feynman-elv alapján, lazító karakterhez s ezzel együtt magasabb energiához vezet. Ez az effektus csak azonos spinű elektronok között lép fel, s így nevezhetjük kicserélődési kölcsönhatásnak.

Utóbbit egy olyan egyszerű alakra hozhatjuk, amely jól illusztrálja a távolsággal való változás típusát. Tekintsük ismét a két alapállapotú hélium-atom esetét, mindkettő legyen  $1s^2$  állapotban,  $\Phi_a$  és  $\Phi_b$  normált atomi pályákkal. Ekkor a Heitler—London hullámfüggvény a következő:  $\Psi = N \det |\Phi_a(1)\bar{\Phi}_a(2)\Phi_b(3)\bar{\Phi}_b(4)|$ , ahol a fölülvonás  $\beta$  spint, annak hiánya pedig  $\alpha$  spint jelöl. Megmutatható, hogy a normálási faktor:  $N = (1 - S^2)^{-1} \sqrt{\frac{1}{4!}}$ . Az  $(1 - S^2)^{-1}$  tag a  $\Phi_a$  és  $\Phi_b$  nem-ortogonális volta miatt jelenik meg. Ha a  $\varphi_a = N'(\Phi_a - \lambda \Phi_b)$ , ... stb. normált ortogonális kombinációkat használjuk, akkor azonnal kimutathatjuk, hogy  $\Psi$  a következő, teljesen ekvivalens alakban írható:

$$\Psi = (4!)^{-1/2} \det |\varphi_a(1)\bar{\varphi}_a(2)\varphi_b(3)\bar{\varphi}_b(4)|.$$

A teljes töltéssűrűség:

$$\varrho = 2\varphi_a^2 + 2\varphi_b^2 = 2\Phi_a^2 + 2\Phi_b^2 - \frac{2S}{1 - S^2} \Delta,$$

ahol

(1)

$$\Delta = 2\Phi_a\Phi_b - S(\Phi_a^2 - \Phi_b^2).$$

Mármost a Hellmann—Feynman elvnek megfelelően a  $B$  magra ható erőt az  $A$  magtól származó taszításnak és a  $\varrho$ -tól

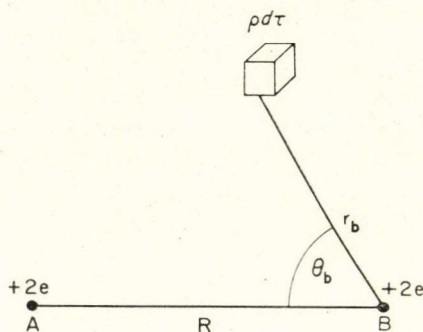
származó vonzásnak a tisztán klasszikus összeadása útján lehet számítani. Ez az erő a  $BA$  egyenes szakasz mentén hat (2. ábra), és alakja:

$$F = \frac{4}{R^2} - 2 \int \frac{\varrho d\tau \cdot \cos \vartheta_b}{r_b^2} \quad (\text{atomi egység}) \quad (2)$$

az  $A$ -tól kifelé induló irányítással. Pozitív  $F$  taszítást, negatív  $F$  vonzást jelent.

Salem [2] kiszámította a (2) erőt, ha  $\varrho$ -t az (1) összefüggés adja meg. Ha feltehetjük, hogy  $S$  olyan kicsiny, hogy egy  $S$  szerinti hatványsor gyorsan konvergál ( $R = 3a_0$ -nál  $S \cong 0,1$  és  $R$  növekedésével  $S$  gyorsan csökken), akkor

$$F = F_1 + F_2 S + F_3 S^2 + \dots$$



2. ábra



ahol

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{4}{R^2} - 4 \int \frac{\Phi_a^2 \cos \vartheta_b}{r_b^2} d\tau; \\ F_2 &= 8 \int \frac{\Phi_a \Phi_b \cos \vartheta_b}{r_b^2} d\tau; \\ F_3 &= -4 \int \frac{\Phi_a^2 \cos \vartheta_b}{r_b^2} d\tau. \end{aligned} \quad (3)$$

$R = 3a_0$ -nál, az egyszerű Kellner-hullámfüggvényt használva, *Salem* kimutatja, hogy

$$F_1 = 0,0011 \text{ a.e. (taszító)}$$

$$F_2 S = 0,0215 \text{ a.e. (taszító)}$$

$$F_3 S^2 = -0,0038 \text{ a.e. (vonzó),}$$

tehát az erőhatásban az  $F_2 S$  taszító tag dominál. (3) szerint ez majdnem teljes egészében az átfedési tartományból származik, ahol  $\Phi_a$  is és  $\Phi_b$  is elfogadható nagyságrendűek. Ezért  $F_2 S$ -et „átfedési erőnek” nevezhetjük.

$F_2 S$ -nek  $R$ -rel történő változását az alábbi 1. táblázat mutatja.

1. táblázat

Az  $F_2 S$  átfedési erő változása  $R$  függvényében két hélium atom esetében

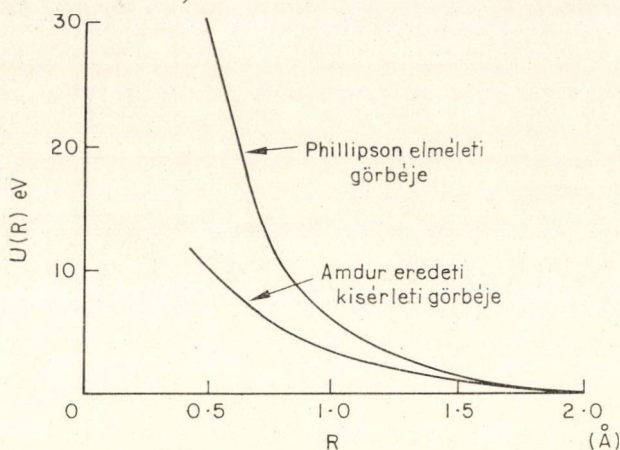
$R(a_0)$	2,5	3	4	5
$F_2 S$	0,79	0,022	0,001	0,00008

E táblázat adataiból az látható, hogy  $R$  csökkenésével  $F_2 S$  igen gyorsan növekszik. A változás nem szigorúan exponenciális; de láthatjuk, hogy a kicserélődési taszítási energiatörvénynek egy ésszerű típusa lehet az exponenciális alakú  $Be^{-CR}$  törvény. Gyakran használt alternatív forma az  $AS^2/R$ . ( $A$ ,  $B$  és  $C$ : konstansok.) Érdemes megjegyeznünk, hogy már *Bleick* és *Mayer* [3], két nemesgáz-atom (pl. He és Ne) kölcsönhatására vonatkozó igen korai számításaikban, közelítőleg exponenciális változást kaptak eredményül.

Természetesen pontos számításokat lehet végezni a He ... He kölcsönhatásra, s a jelenlegi számítógépek elég nagyok ahhoz, hogy a Ne ... Ne rendszerre vonatkozóan is számottevő eredményeket nyerhessünk. A mi szempontunkból a nemesgáz-atomok túlságosan egyszerűek, s így az ilyen számítások eredményei csupán általános érdekességük, mivel megerősítik azokat a sokkal durvább következtetéseket, melyeket egyszerű függvényekkel kaptunk. Ilyen típusú számításokra kiemelkedő példa a *Phillipsoné* [4], aki a két He atom között ható erőket tanulmányozta a  $0,5\text{\AA} \leq R \leq 2,0\text{\AA}$  tartományban, egy nem kevesebb mint 64 kölcsönható konfigurációból megalkotott hullámfüggvényt használva. A legkisebb négyzetek elve alapján kapott  $U(R) = 191,47e^{-3,8486R} \text{ eV}$  törvényhez ( $0,5\text{\AA} \leq R \leq 1,0\text{\AA}$ ) a számított energiák 4%-on belül illeszkednek. A számított görbét a 3. ábra mutatja, amelyen a görbe esésének exponenciális típusa jól látható ( $R = 2\text{\AA}$ -nél majdnem 0-hoz tart). Ez az ábra azokat az energiaértékeket is mutatja, melyeket eredetileg kísérleti úton származtattak *Amdur* és társai. Érdekes — és biztató — gondolat, hogy amikor *Phillipson*



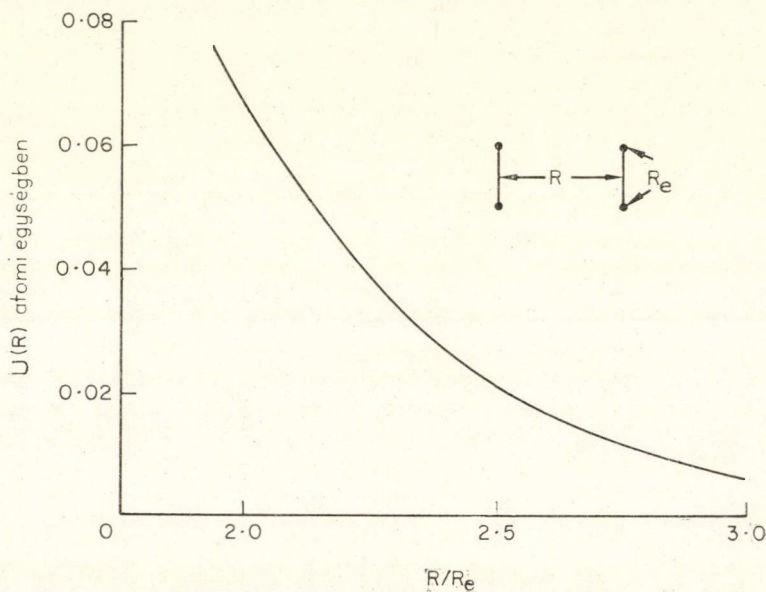
számításait közölték, újra megkísérelték értelmezni azok eltérését *Amdur* méréseitől; azt találták, hogy ez utóbbiak korrekcióra szorulnak [5], s így most erre az egy rendszerre nézve csaknem határozott energiagörbével rendelkezünk.  $U(R)$ -nek az ennél bonyolultabb rendszerekre vonatkozó tisztán elméleti számítása annyira



3. ábra. Két hélium-atom kölcsönhatási energiája

kell hagyatkoznunk. Ez a tag azonban rendszerint a domináns taszító hozzájárulást adja a teljes energiához.

hosszadalmas, hogy majdnem lehetetlen. Valószínűleg a jelenlegi legjobb tisztán molekuláris kölcsönhatás-számítások *Magnasco* és *Musso* [6] két  $H_2$  molekulára vonatkozó számításai. A 4. ábra azt mutatja, hogy a paralel konfigurációban levő két ilyen molekula esetében az  $U(R)$  görbe általános képe igen hasonló a két He atom  $U(R)$  görbéjének alakjához. Ez utóbbi diskusszióból világos, hogy nem sok fejlődés várható, ha a kicserélődési energiának teljesen elméleti kifejezéseire

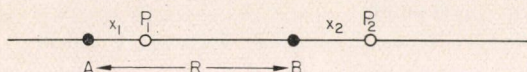


4. ábra. Két  $H_2$  molekula kölcsönhatási energiája derékszögű konfigurációban



## 5. Diszperziós energia

Hátra van még az előzőekben említett harmadik fő energiatípus. Ez a London-féle diszperziós energia [7]. Ennek fizikai eredete a két kölcsönható molekulában levő elektronok mozgásához rendelhető momentán dipólok kölcsönhatásában keresendő. A kölcsönhatás eredményeképp ezek a fluktuáló dipólok azonos fázis felvételére törekszenek, melynek eredménye az, hogy kvantummechanikai átlaguk nem tűnik el. Mint már várhattuk is az átlagértékképzésre vonatkozó korábbi megjegyzéseink alapján, ezt a tagot általában  $R^{-6}$ -hatványtörvény írja le. Ez mindig



5. ábra. Két csatolt oszcillátor kölcsönhatása

a két rendszer közötti vonzó hatásnak felel meg, és nagy távolságok esetén többnyire számszerűleg dominál.

Az előbb említett átlagolási eljárás arra a feltevésre vezethetne minket, hogy a diszperziós erők klasszikus eredetűek. Ez azonban nem így van: azok igen határozottan kvantummechanikai eredetűek, mint azt a *Longuet—Higginstől* [8] származó, *London* [9] korábbi ötletein alapuló következő fejtegetés mutatja. Tekintsünk (5. ábra) két,  $\nu_0$  klasszikus frekvenciával rendelkező lineáris oszcillátort, ahol is a két elektron koordinátája a megfelelő centrumuktól mérve  $x_1, x_2$ . A két rendszer kicsiny,  $x_1$ -gyel és  $x_2$ -vel arányos momentumú elektromos dipólokhoz fog hasonlítani, s így kölcsönhatásuk  $V = a x_1 x_2$  alakú lesz. (Reális esetben az  $a$  koefficiens  $1/R^3$ -nel lenne arányos, de ez jelenlegi céljaink szempontjából nem lényeges.) Klasszikus értelemben egyszerű, jól definiált problémával rendelkezünk, melyben az  $a x_1 x_2$  csatolási tag két új normál modushoz vezet az  $x_1 \pm x_2$  normál koordinátákkal és a  $\nu_{\pm}$  új frekvenciákkal. Könnyen kimutatható, hogy  $\nu_+^2 + \nu_-^2 = 2\nu_0^2$ . Mármost egy klasszikus harmonikus oszcillátor eloszlásfüggvénye  $kT/h\nu$ , s így a kombinált rendszer szabadenergiája a kölcsönhatás eredményeképp  $\Delta F$ -fel megváltozik, melynek nagysága:

$$\Delta F = kT \log (\nu_+ \nu_- / \nu_0^2).$$

$\Delta F$  biztosan negatív, mivel  $\nu_+ \nu_- < \frac{1}{2}(\nu_+^2 + \nu_-^2) = \nu_0^2$ . Tehát ha  $a$  a távolsággal csökken, akkor valóban vonzóerő fog fellépni. Ha azonban  $\Delta F$ -et szétválasztjuk egy energiatagra és egy entrópiatagra, akkor azt látjuk, hogy az erő teljesen az utóbbitól származik. Szó sincs a szokásos értelemben vett direkt erőről!

Ha azonban ugyanezt a számítást kvantummechanikailag hajtjuk végre, megint két,  $\nu_{\pm}$  frekvenciára jutunk; de ekkor fellép egy kölcsönhatási energia, melyet a  $\Delta E = \frac{1}{2}h(\nu_+ + \nu_- - 2\nu_0)$  összefüggés ad meg. Ez a zéruspont-energiákban fennálló különbségből származik, tehát nagyonis nem-klasszikus erő. Az adódik, hogy  $\Delta E \propto a^2$ , tehát ha  $a \propto R^{-3}$ , következik, hogy  $\Delta E \propto R^{-6}$ .  $R$ -nek ugyanaz a hatványa fordul elő, de most látható, hogy a diszperziós erő nem statisztikus — vagy hőmérsékleti — effektus.

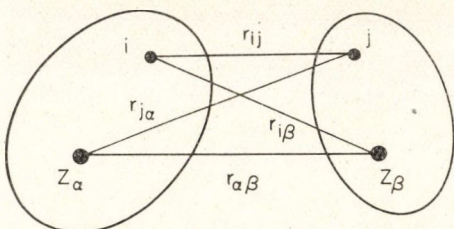
Érdekes, hogy nem kevesebb mint három kölcsönhatási erőnek ugyanolyan típusú az  $R$ -től való függése. A dipól-dipól (vagy orientációs) erő, a dipól-indukált-



dipól (vagy indukciós) erő és a diszperziós erő egyaránt  $R^{-6}$ -nal arányos energiához vezetnek. E három erőfajta közül normális esetben az indukciós erő számszerűleg a legkisebb. A másik két erő rendszerint jobban összehasonlítható nagyságrendű.

#### 6. Az orientációs, indukciós és diszperziós erők matematikai megfogalmazása

Létezik egy egyszerű és egységes matematikai módszer a fent említett 3 erő-típus közül kettőnek a tárgyalására. Ez természetszerűen perturbációs módszer, melyben a  $V$  kölcsönhatási potenciált tekintjük perturbációnak, mely a két alapállapotú nem-kölcsönható molekulából (vagy atomból) álló nem-perturbált rendszerre hat. Ha  $\alpha$  és  $\beta$  (6. ábra) jelöli  $A$ -nak és  $B$ -nek a tipikus magjait,  $Z_\alpha$  és  $Z_\beta$  magtöltésekkel;  $i, j$  pedig a két molekulában levő tipikus elektronokat jelöli, akkor  $V$ : az elektron-elektron, elektron-mag és mag-mag potenciálok összege, alakja pedig (atomi egységekben):



$$V = \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i,\beta} \frac{Z_\beta}{r_{i\beta}} - \sum_{j,\alpha} \frac{Z_\alpha}{r_{j\alpha}} + \sum_{\alpha,\beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{r_{\alpha\beta}}.$$

(4)

6. ábra. Jelölések a  $V$  kölcsönhatási taghoz

Legyenek az  $A$ -hoz és  $B$ -hez tartozó normált alapállapotú hullámfüggvények  $\Phi_{a0}$  és  $\Phi_{b0}$ ; a gerjesztett állapotokat leíró hullámfüggvények pedig  $\Phi_{an}$ ,  $\Phi_{bm}$ , a  $\Delta E_{an}$  és  $\Delta E_{bm}$  gerjesztési energiákkal. Ekkor a standard perturbáció-elmélet alapján a perturbált rendszer teljes energiája:

$$E = E_a + E_b + V_{00,00} - \sum_n \sum_m \frac{|V_{00,nm}|^2}{\Delta E_{an} + \Delta E_{bm}} + o(V^3),$$

(5)

ahol

$$V_{00,nm} = \int \Phi_{a0}^* \Phi_{b0}^* V \Phi_{an} \Phi_{bm} d\tau,$$

(6)

és az (5) kifejezés másodrendű tagjában a szummázás kiterjed  $n$  és  $m$  összes értékére, kivéve az  $n=m=0$  esetet (melyben természetesen  $\Delta E_{an} + \Delta E_{bm}$  zérus lenne!).

Most interpretálnunk kell az (5) összefüggést. Az  $E_a$  és  $E_b$  tag: a szeparált rendszerek energiája. Az elsőrendű tag:  $V_{00,00}$ . Ez csak a két rendszer nem-perturbált hullámfüggvényeitől függ, és helyesen nevezik elektrosztatikus tagnak, mivel az  $A$ -ban és  $B$ -ben levő töltéeloszlások direkt elektrosztatikus kölcsönhatását méri. Ha  $A$  és  $B$  nem-poláros, akkor ez a tag valószínűleg kicsiny; azonban minden esetben kiszámítható. Továbbá, ha  $A$  és  $B$  elég távol vannak egymástól, akkor az  $A$ -nak, ill.  $B$ -nek a teljes töltéssűrűségét — beleértve mind az elektront, mind a magokat — reprezentálhatjuk egy monopóllal, dipóllal, kvadrupóllal, ..., mindegyik molekulában egy megfelelő origóra vonatkozólag. Ekkor (6) különböző tagok összegére redukálódik, melyeket dipól-dipól, dipól-kvadrupól, ... stb. tagoknak nevezhetünk. Ily módon felismerhetjük a 3. §-ban adott előzetes beszámoló részleteit.

Az (5) összefüggés következő tagja — a másodrendű energia — egy kettős összeg; ezt azonban felbonthatjuk 3 részre. Az első részben rögzítjük az  $n=0$  értéket és  $m$ -re összegzünk; a másodikban az  $m=0$  értéket rögzítjük és  $n$ -re összegzünk;



a harmadik részben  $n, m \neq 0$  értékeire összegzünk. (Az  $m = n = 0$  tagot nem engedhetjük meg, mivel ez az (5) perturbációs sorfejtésből ki van zárva.) Amikor  $n = 0$  mellett összegzünk  $m$ -re, akkor számításba vesszük a  $B$  rendszernek az  $A$  elektrosztatikus terétől származó deformációját. Ez tehát a  $B$ -nek az  $A$  általi polarizációjából eredő indukciós tagot szolgáltatja. A tagok következő csoportja,  $m = 0$  érték mellett, az  $A$ -nak a  $B$  általi polarizációjából származó indukciós tagot adja. A kettő együtt nyújtja a 3. §-ban szereplő második tagot. Végül az  $m, n \neq 0$  értékekre történő összegzés adja az 5. §-ban tárgyalt diszperziós erőt.

Ha sem  $m$ , sem  $n$  nem egyenlő zérussal, akkor a  $V_{00, nm}$  kifejezést egyszerű alakra tudjuk hozni. Amiatt a tény miatt, hogy az  $A$  és  $B$  összes gerjesztett állapotait leíró hullámfüggvények ortogonálisak a megfelelő alapállapotú hullámfüggvényekre, következik, hogy általában a (4) kifejezésben  $V$ -nek csak az első tagja (azaz a két-elektron-tag) nem tűnik el. Tehát a diszperziós erő tisztán elektronoktól származik, s a következő energiát eredményezi:

$$E_{\text{diszperziós}} = - \sum_{n, m \neq 0} \frac{|V_{00, nm}|^2}{\Delta E_{an} + \Delta E_{bm}} \quad (7)$$

melyben

$$V_{00, nm} = \int \Phi_{a0}^* \Phi_{b0}^* \sum_{i, j} \frac{1}{r_{ij}} \Phi_{an} \Phi_{bm} d\tau. \quad (8)$$

(7)-nek és (8)-nak megfelelően mindegyik  $m, n$  átmenet-pár additive járul hozzá a diszperziós energiához. A (7) nevezőjében szereplő  $\Delta E_{an} + \Delta E_{bm}$  tag következményeképp a magasabb gerjesztések kisebb mértékű hozzájárulást adnak, mint az alacsonyok. Igen gyakran a teljes diszperziós energia nagy része csupán egy vagy két ilyen virtuális gerjesztésből származik. Ilyen esetben a (7) kifejezésben az összegzés egyszerűsödik.

A kölcsönhatási energia naggyá válik, ha van olyan alacsonyan elhelyezkedő állapot, mely megközelíthető az alapállapotból, mivel ekkor van egy olyan tag a (8) összegben, melynek a nevezője kicsiny. Ez az eset áll fenn színes molekula esetén. Tehát azt az általános szabályt kapjuk, hogy a színes anyagoknak nagy szublimációs energiájuk van, míg a paraffinok és a szénhidrogének fluorszármazékai, melyek az u.v. tartományban átlátszóak, s melyek esetén egyetlen tag nevezője sem kicsiny, illóak. Eszerint párhuzam van a szublimációs energia és a polarizálhatóság (illetve a törésmutató) között, mely az elektronok kötésének erősségét méri. Valóban, a (8) kifejezés egy egyszerű átalakítása a következő közelítő eredményre vezet:

$$E_{\text{diszp.}} = - \frac{3}{2} \frac{I_A I_B}{I_A + I_B} \frac{\alpha_A \alpha_B}{R^6},$$

ahol  $I_A, I_B$ : a legalacsonyabb ionizációs potenciálok;  $\alpha_A, \alpha_B$  pedig  $A$ -nak és  $B$ -nek az (izotrópnak feltételezett) polarizálhatósága.

A (8) kifejezésben az összegzés tovább egyszerűsíthető, mint eredetileg még London [10] javasolta, ha figyelmünket külön-külön az egyes átmenetekre fordítjuk. Jelöljük  $\varrho_{0n}^A$ -val és  $\varrho_{0m}^B$ -vel az  $A$ -ban létrejövő  $0 \rightarrow n$ , illetve  $B$ -ben lejátszódó  $0 \rightarrow m$  átmenetek elsőrendű átmeneti sűrűségeit. Tehát

$$\begin{aligned} \varrho_{0n}^A(i) &= \int \Phi_{a0}^* \Phi_{an} d\tau'; \\ \varrho_{0m}^B(j) &= \int \Phi_{b0}^* \Phi_{bm} d\tau', \end{aligned} \quad (9)$$



ahol az integrálás  $\varrho_{0n}^A(i)$ -ben kiterjesztendő az  $A$  összes elektronjára az  $i$ -edik kivételével;  $\varrho_{0m}^B(j)$  esetében hasonlóképpen. Mármint, az  $A$  összes  $N_A$  számú elektronjának, illetve a  $B$  összes  $N_B$  elektronjának ekvivalenciája miatt, (8)-ban valamennyi tag ugyanazt a mennyiséget eredményezi, tehát

$$V_{00,nm} = N_A N_B \int_A \varrho_{0n}^A(i) \frac{1}{r_{ij}} \varrho_{0m}^B(j) d\tau_i d\tau_j. \quad (10)$$

Ez pusztán a két,  $N_A \varrho_{0n}^A$ , illetve  $N_B \varrho_{0m}^B$  töltéssűrűségekkel rendelkező töltésfelhő elektrosztatikus kölcsönhatása. Ezen egyrészesecske-sűrűségek mindegyikéhez zérus össztöltés tartozik, mivel  $\Phi_{a0}$  és  $\Phi_{an}$  ortogonalitása miatt  $\int \varrho_{0n}^A(i) d\tau_i = 0$ . Így tehát lesznek olyan térrészek, ahol  $\varrho_{0n}^A$  pozitív, s más térrészek, ahol negatív. Osszuk fel a teret valamilyen alkalmas módon ilyen részekre: mindegyik tartományban a töltésfelhőt egy megfelelő ponttöltéssel helyettesíthetjük. Ekkor (10)-ben  $V_{00,nm}$  egy  $A$ -hoz tartozó monopól-rendszernek egy  $B$ -hez tartozó másik rendszerrel való kölcsönhatását írja le.

Ennek az eljárásnak a fő nehézségét nyilvánvalóan a különböző monopólok elhelyezésének megválasztása jelenti. Coulson és Davies [11] azonban megadta ennek a monopól-közelítésnek egy, az egyszerű *LCAO* modellen belül érvényes változatát. Feltesszük, hogy  $A$  (ill.  $B$ ) minden egyes elektronja egy olyan molekulapályához (*MO*) rendelhető, melyet az  $A$ -hoz (ill.  $B$ -hez) tartozó megfelelő atomi pályák (*AO*) lineáris kombinációjaként adunk meg. Írja le  $A$  (ill.  $B$ ) alapállapotát egy egyetlen determinánsból álló hullámfüggvény, melyben a legalacsonyabb  $\frac{1}{2} N_A$  (ill.  $\frac{1}{2} N_B$ ) számú molekulapálya mindegyike kétszeresen betöltött. Egy  $n$  gerjesztett állapotot egy ettől eltérő konfiguráció reprezentál. (9)-ből következik, hogy  $\varrho_{0n}^A(i)$  akkor vesz fel zérustól különböző értékeket, ha csak egy pálya volt gerjesztett, a  $\Phi_{a0}$ -ról  $\Phi_{an}$ -re történő átmenet révén. Tegyük fel, hogy ez a gerjesztés a  $\chi_p$  *MO*-ról a  $\chi_q$  *MO*-ra történt az  $A$  rendszerben. Ekkor, mint Coulson és Davies kimutatják,

$$N_A \varrho_{0n}^A(i) = 2^{\pm} \chi_p(i) \chi_q(i).$$

Így (10) a következő alakú lesz:

$$V_{00,nm} = 2 \int \chi_p(i) \chi_q(i) \frac{1}{r_{ij}} \chi_{p'}(j) \chi_{q'}(j) d\tau_i d\tau_j, \quad (11)$$

ahol az  $m$  gerjesztés  $B$ -ben  $\chi_{p'}$ -ről  $\chi_{q'}$ -re történt.

Mármint minden *MO*, mint  $\chi_p$  is, atomi pályák összege ismert koefficiensekkel. Tehát a (11) kifejezés integrálok összegére redukálódik. Ezek között lesznek kétcentrumúak, három- és négycentrumúak. A 3- és 4-centrumú integrálok rendszerint kicsinyek, s ha elfogadjuk a *Pariser—Parr*-féle [12] zérus differenciális átfedés-közelítést, akkor csak a 2-centrumú Coulomb-taszítási tagok maradnak meg. Ezeket vagy zárt alakban számíthatjuk, vagy pedig — valószínűleg azonos érvényességgel! — helyettesíthetjük őket ponttöltés-kölcsönhatásokkal. Ez utóbbi esetben a London-féle monopólok: a különböző magokra lokalizált ponttöltések.

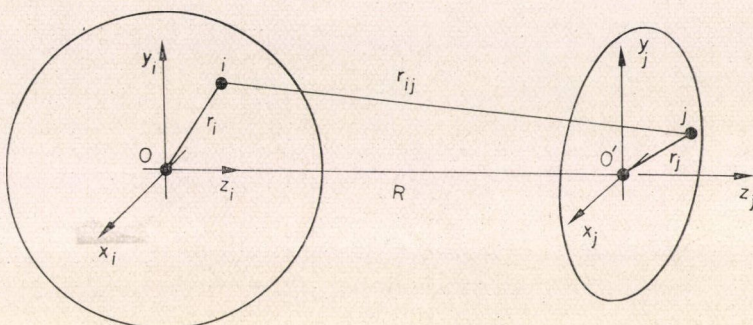
Ez a módszer elég könnyen alkalmazható; a későbbiekben hivatkozni is fogunk néhány részleteredményre, amelyet ezzel nyertünk. De mielőtt befejeznénk a diszperziós erők tárgyalását, utalnunk kell a (8)-ban megadott  $V_{00,nm}$ -nek egy másik



sorbafejtésére. Ezt multipól-sorfejtésnek nevezhetjük, megkülönböztetésül az előbb tárgyalt monopól-sorfejtéstől.

Térjünk vissza az  $E_{\text{diszp.}}$  és  $V_{00,nm}$  (7) és (8) kifejezéseire. (8)-at a következő alakban írhatjuk:

$$V_{00,nm} = N_A N_B \int \Phi_{a0}^* \Phi_{b0}^* \frac{1}{r_{ij}} \Phi_{an} \Phi_{bm} d\tau. \quad (12)$$



7. ábra

Legyen  $O$ , ill.  $O'$  (7. ábra) az  $A$ , ill.  $B$  pozitív magtöltéseinek a centruma. Ekkor, az  $O$ -nál és  $O'$ -nél az ábrán jelzett módon felvett lokális tengelyekre vonatkozólag,  $\frac{1}{r_{ij}}$  egyszerű sorfejtése a következő eredményt adja:

$$\frac{1}{r_{ij}} = \frac{1}{R} + \frac{1}{R^2} (x_j - x_i) + \frac{1}{2R^3} \{3x_i^2 - r_i^2 + 3x_j^2 - r_j^2 - 2(2x_i x_j - y_i y_j - z_i z_j)\} + o(R^{-4}) \quad (13)$$

Ha (13)-at (12)-be helyettesítjük, az  $R^{-1}$ -t és  $R^{-2}$ -t tartalmazó tagok eltűnnek az alap- és gerjesztett állapotú függvények ortogonalitása miatt. Ugyancsak eltűnnek az  $R^{-3}$ -t tartalmazó tagok, kivéve az utolsó csoportot. Így, ha  $n, m \neq 0$ , következik, hogy —  $R^{-3}$ -ig terjedő pontossággal —

$$V_{00,nm} = -\frac{N_A N_B}{R^3} \int \Phi_{a0}^* \Phi_{b0}^* \{2x_i x_j - y_i y_j - z_i z_j\} \Phi_{an} \Phi_{bm} d\tau \quad (14)$$

A (7) kifejezésből azonnal láthatjuk, hogy a diszperziós energia  $R^{-6}$ -al változik. Továbbá, mivel  $\int \Phi_{a0}^* x_i \Phi_{an} d\tau_i$  a  $0 \rightarrow n$  átmenethez tartozó dipólmomentum-operátor, következik, hogy csak olyan gerjesztett állapotok valósulnak meg, amelyek az alapállapotból elérhetők mind  $A$ -ban, mind  $B$ -ben azonos polarizációjú dipól-átmenetekkel. Így ismét látjuk, miért neveztük ezt a tagot dipól-dipól tagnak a diszperziós energiában. A magasabb tagok magasabb multipóloknak felelnek meg, úgy hogy a teljes (14) sorfejtést az  $\frac{1}{r_{ij}}$  multipól-sorfejtésének nevezzük.



Természetesen ezeket a magasabb tagokat is figyelembe vehetjük. Nagy  $R$ -értékeknél ezek kicsinyek, de van egy tartomány, amelyben ezen tagok közül néhány jelentékeny nagyságú lehet. Ezeket eddig csupán a  $H \dots H$  és  $He \dots He$  kölcsönhatások esetében számították, melyekre nézve [13, 14] a rendelkezésre álló legjobb kifejezések (atomi egységekben):

$$E_{\text{diszp.}}(H \dots H) = - \left\{ \frac{6,4990}{R^6} + \frac{124,4}{R^8} + \frac{3285}{R^{10}} + \dots \right\}$$

$$E_{\text{diszp.}}(He \dots He) = - \left\{ \frac{1,471}{R^6} + \frac{14,1}{R^8} + \frac{182}{R^{10}} + \dots \right\}$$
(15)

Az első tag koefficiensére megfelelő értéksorozatot ajánlott *Dalgarno* [15], 16 különböző fajtájú kölcsönhatás mindegyikére.

Ha csupán a dipól-dipól tagokra szorítkozunk, akkor (14)-et felírhatjuk a különböző megengedett átmenetek  $f$ -értékeivel kifejezve. Ezeket a következőképpen definiáljuk:

$$f_{an} = \frac{2}{3} \Delta E_{an} \left| \int \Phi_{a0}^* (\sum_i \vec{r}_i) \Phi_{an} d\tau \right|^2,$$

tehát

$$E_{\text{diszp.}} = - \frac{3}{2R^6} \sum_{n,m} f_{an} f_{bm} \frac{\{\Delta E_{an} \Delta E_{bm}\}^{-1}}{\Delta E_{an} + \Delta E_{bm}}$$
(16)

Bonyolult molekulák esetében ezt a módszert néha felhasználják  $V_{00,nm}$  és ebből a diszperziós energia meghatározására. Ha megfelelő számú abszolút intenzitást tudunk mérni, akkor hullámfüggvényekre egyáltalán nem kell hivatkoznunk. Nem-szerencsés módon azonban a (7) és (16) kifejezésekben az összegzés ki van terjesztve az összes gerjesztett állapotra, beleértve a kontinuum-tartományban levőket is; s a He-ra végzett explicit számítás azt mutatja, hogy ezektől a kontinuum-állapotoktól nem mindig tekinthetünk el. Emiatt, amikor nagy molekulákat tárgyalunk, nagy a kísértés, hogy elfogadjuk *Unsöld*-nek a teljességi összefüggésen alapuló közelítését [16]. Ez lehetővé teszi, hogy az összegzést egyszerű matrix-formulákkal valósítsuk meg. Ha a (7) kifejezés nevezőiben szereplő energiákat egy bizonyos  $\overline{\Delta E}$  átlag-gerjesztéssel helyettesítjük, akkor

$$E_{\text{diszp.}} = - \frac{1}{\overline{\Delta E}} \sum_{n,m \neq 0} V_{00,nm} V_{nm,00} =$$

$$= - \frac{1}{\overline{\Delta E}} \left\{ (V^2)_{00,00} - \sum_{m \neq 0} |V_{00,am}|^2 - \sum_{n \neq 0} |V_{00,n0}|^2 - (V_{00,00})^2 \right\}$$
(17)

(17)-ben a középső két tag egyszerű kapcsolatban van az indukciós energiával. (17) felvételének legkomolyabb akadálya az, hogy nem tudunk egyetlen értéket meghatározni  $\overline{\Delta E}$ -ra. Az ionizációs potenciálok összegével egyenlő  $\overline{\Delta E}$  érték valószínűleg 25%-nál nem nagyobb mértékben pontatlan.



Újabban nagy jelentőségű eljárást dolgoztak ki (16) kiszámítására [15, 17], felhasználva azt az eredményt, hogy ha  $a, b < 0$ , akkor

$$\frac{1}{a+b} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{ab \, du}{(u^2+a^2)(u^2+b^2)}. \quad (18)$$

Ha  $a = \Delta E_{an}$ ,  $b = \Delta E_{bm}$ , tehát az  $a, b > 0$  feltétel tartalmazza, hogy a rendszereket alapállapotukban tekintjük, akkor következik, hogy

$$E_{\text{diszp.}} = -\frac{3}{\pi R^6} \int_0^{\infty} \alpha_A(i\omega) \alpha_B(i\omega) d\omega, \quad (19)$$

ahol

$$\alpha_A(\xi) = \sum_n \frac{f_{a,n}}{\Delta E_{an}^2 - \xi^2}. \quad (20)$$

A (20) formulából látható, hogy  $\alpha_A(\xi)$  az  $A$  rendszer elektromos polarizálhatósága, ha a tér frekvenciája  $\xi$ . Így (19)-ből látjuk, hogy a diszperziós energiát olyan két mennyiség szorzatának integráljára redukáltuk, melyek közül az egyik  $A$ -nak a polarizálhatósága az  $i\omega$  képzetes frekvenciánál, a másik pedig a  $B$ -re vonatkozó ugyanazon mennyiség. Ha megfelelő  $\alpha(\xi)$  mennyiségeket tudunk akár számolni, akár kísérleti úton nyerni, akkor az nagyban megkönnyítheti a diszperziós energia elkövetkező számítását.

### 7. *A Lennard—Jones és a Kihara-potenciál*

Ha kombináljuk az előzőekben tárgyalt vonzó és taszító tagokat, megértjük a jól ismert

$$V(R) = \frac{A}{R^n} - \frac{B}{R^6} \quad (21)$$

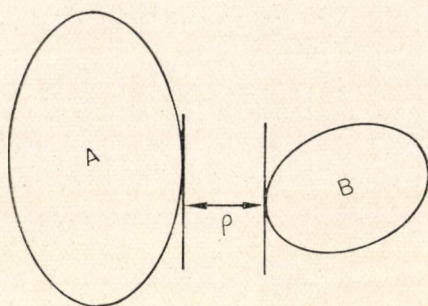
Lennard—Jones-formula eredetét. Szilárd testek esetében úgy találták, hogy a 9 és 15 közötti  $n$ -értékek elfogadhatóak, de a szokásos érték  $n=12$ . Ez az úgynevezett „6—12” potenciál. Ha viszont előnyben részesítjük a taszító erő exponenciális alakjának használatát, akkor

$$V(R) = Ae^{-cR} - \frac{B}{R^6}; \quad (22)$$

ez az ún. „exp—6”-törvény. Mind a (21), mind a (22) formulát elég széles körben használják a gázok második és harmadik viriál-koefficiensének mért értékeivel való egyeztetésre [18], amikor is (22) meglehetősen jobb egyezést mutat, mint (21). Ennek révén  $A$ ,  $B$  és  $C$  értékeit nagy számú atomra és kis molekulára meghatározták már.

Ezek a kifejezések mindamellett nem nagyon ésszerűek olyan nagyobb rendszerek kölcsönhatásának leírására, mint a sokatomos molekulák. Ez főleg abból ered, hogy nincs olyan megfelelő origó, amelyre vonatkoztatva a molekulák közötti  $R$  távolságot mérhetnénk. A taszító erők kicserélődési erők, s mint azt a 4. §-ban





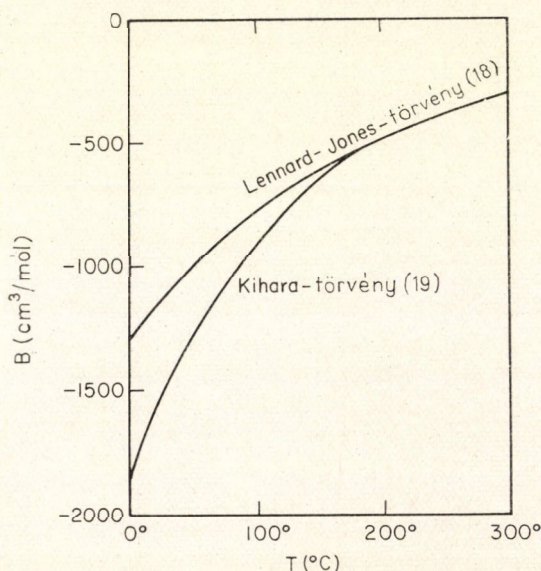
8. ábra. Jelölések a Kihara-féle kölcsönhatási potenciálhoz

gondolhatjuk, és a két felület közti legkisebb  $q$  távolságot (l. 8. ábra) olyan változónak tekinthetjük, melynek függvényében a kölcsönhatási energia sorbafejthető. A (21) Lennard—Jones-törvénnyel analóg módon Kihara a következő empirikus törvényt javasolja:

$$V(q) = \frac{A}{q^{12}} - \frac{B}{q^6}; \quad A \text{ és } B \text{ konstansok.}$$

Ezt az alábbi alakban írhatjuk:

$$V(q) = V_0 \left\{ \left( \frac{q_0}{q} \right)^{12} - 2 \left( \frac{q_0}{q} \right)^6 \right\}. \quad (23)$$



9. ábra. A benzolgőzre vonatkozó második viriál-koefficiens

láttuk, azok az  $A$  és  $B$  töltésfelhőinek átfedéséből származnak. Ebből következik, hogy a kicserélődési erő lokalizált eredetű, eltérően a diszperziós és az elektrosztatikus erőktől, amelyek nagy hatótávolságúak. Emiatt Kihara [19] bevezetett (21) vagy (22) helyettesítése céljából nagy méretű rendszerekre egy empirikus kölcsönhatási törvényt. Tegyük fel, hogy  $A$  és  $B$  körül vannak véve valamilyen alkalmas határfelülettel. Ez erősen emlékeztethet a van der Waals-rádiuszokra, melyeket a 8. §-ban fogunk tárgyalni. Ezeket a felületeket majdnem áthatolhatatlan gátnak

(23)-ban  $q_0$  az a távolság, melynél az adott helyen vett  $-\text{grad } V$  erő eltűnik.  $V_0$  és  $q_0$  számszerű értékeit nagy számú atomra és molekulára megtalálhatjuk a [19] alatti utalás második cikkében. Ez a potenciál majdnem biztosan a legjobb potenciál, amely jelenleg molekula-kölcsönhatásokra vonatkozóan rendelkezésre áll. Mivel a legkisebb  $q$  megközelítési távolság függ mind  $A$  és  $B$  centrumainak helyzetétől, mind pedig azok kölcsönös elhelyezkedésétől, ez a potenciál alkalmazható olyan nagymértékben nemgömbösszimmetrikus rendszerekre, mint a benzol, melyre a Lennard—Jones-típusú potenciál használható. Olyan izolált atomok kölcsönhatásakor, mint a nemesgázok, a törzset úgy tekinthetjük, mint egy a magnál lokalizált egyszerű pontot.

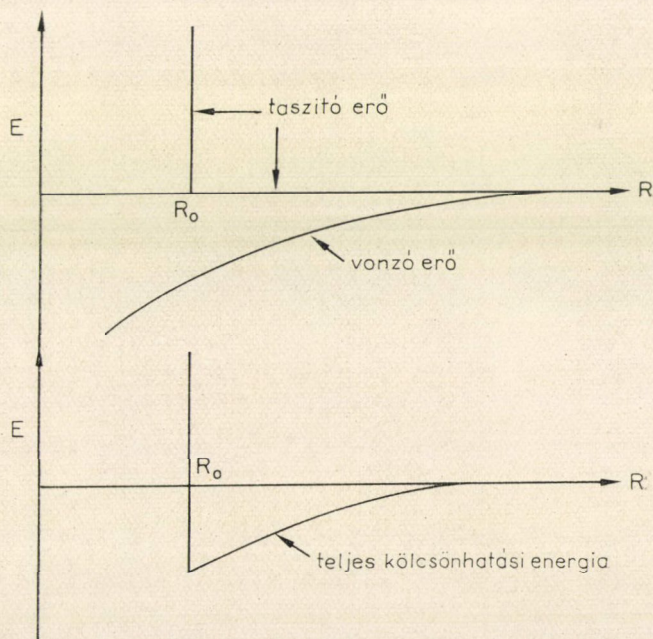


Ekkor  $\varrho = R$ , és (23) átmegy a hagyományos Lennard—Jones-törvénybe. Nem-gömb-szimmetrikus molekuláknál ez az új törvény a régi nagyméretű tökéletesítésének bizonyul, mint azt a benzolgőz  $B(\tau)$  második viriál-koefficiensének példája mutatja (l. a 9. ábrát, melyet a [19b]-ből vettünk át).

### 8. A van der Waals-rádiusz

Sok különböző fajta molekulakristályban a legszorosabb megközelítés távolságára végzett rendkívül pontos mérések eredményeképp a kémiai krisztallográfusok azt találták, hogy valószínűleg minden atompárra nézve karakterisztikus távolságok léteznek; ezek olyanok, hogy a kérdéses atomok ritkán találhatók egymáshoz közelebb, mint az erre a párra vonatkozó karakterisztikus távolság. Ily módon minden atomra nézve sugarakat állapítottak meg, és a karakterisztikus távolságok pusztán ezeknek a sugaraknak az összegei. E sugarakat nevezik az atomok van der Waals-rádiuszának.

Paraffin kristályokban például két hidrogénatomnak a legszorosabb megközelítési távolsága rendszerint a  $2,48\text{--}2,50\text{\AA}$  tartományban van. A hidrogén VDW rádiusza tehát  $1,25\text{\AA}$  körüli érték. A szénatom VDW sugara körülbelül  $1,7\text{\AA}$ . Az egyéb atomokra vonatkozó értékeket a legtöbb alapvető könyvben megtalálhatjuk. A periódusos rendszer valamely sora mentén balról jobb felé haladva ezek a sugarak csökkennek (a nemesgázok ebben némileg kivételt képeznek); egy-egy sor mentén lefelé haladva pedig a rádiuszok növekednek.



10. ábra. Az atom van der Waals-rádiusza

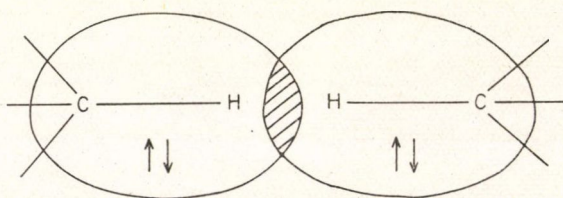


Az interatomos és intermolekuláris erőkre vonatkozó előző vizsgálatunk megteremtette annak a lehetőségét, hogy ezeket a VDW rádiuszokat tanulmányozzuk, és megvizsgáljuk, milyen körülmények között várható, hogy az értékük effektíve konstans. Fejtegetésünket legegyszerűbb lesz az  $A$  és  $B$  azonos atomok közelítésének tárgyalásával szemléltetni, melyeknek egymástól való  $R$  távolságát változtatjuk.

Tudjuk, hogy az  $A$  és  $B$  közötti teljes kölcsönhatás egy vonzó és egy taszító tagból áll. A vonzási energia  $R$  függvényében nem változik igen gyorsan. A 10. ábra egy tipikus görbét ábrázol. A taszító tag viszont sokkal gyorsabban változik. Először vizsgáljuk meg, mi történik, ha feltesszük, hogy  $R > R_0$  esetén a taszítóerő zérus,  $R < R_0$  esetén pedig végtelen. A megfelelő energia a 10. ábrán látható. A vonzó és taszító tagok összegét a diagram alsó részén tüntettük fel. Világosan látszik, hogy ennek  $R = R_0$ -nál minimuma van. Az atomok egészen  $R = R_0$ -ig elmozdulhatnak egymás irányába, de  $R_0$ -nál közelebb sohasem kerülhetnek egymáshoz. Ez igen jól definiált,  $\frac{1}{2} R_0$ -lal egyenlő VDW rádiusz-értéket eredményezne.

A 10. ábrából világos, hogy általában csak akkor kaphatunk ilyen típusú jól meghatározott minimumot, ha a taszítóerő kezdetben végtelenül meredek. Ilyen esetben az előbb vonzóerőnek nevezett erőhatásba beleérthetjük az összes többi, elektrosztatikus és diszperziós jellegű erőket. Ez módosítani fogja a vonzást reprezentáló görbét, s megváltoztatja az utolsó minimum mélységét; azonban nem változtatja meg  $R_0$  értékét. Tehát a kísérletileg mért VDW rádiuszoknak a létezése önmagában is arra utal, hogy bár nem indokolt azt várni, hogy a természetes taszító energiák végtelen meredekséggel növekednek, azonban mindenesetre igen gyorsan nőnek. Így egy atom „keménysége” vagy „lágysága”, melyet azzal mérhetünk, hogy milyen könnyen lehet a VDW rádiuszok összegénél kisebb távolságokat elérni, majdnem egészében a taszító energia növekedésének meredekségétől függ.

A 4. §-ban rámutattunk, hogy két atom közötti távolság csökkenésével a kicserélődési energia gyorsan nő. Természetesen azonban pontosan ugyanazt a gondolatmenetet alkalmazhatjuk, ha az atomok különálló molekulák részei (vagy akár ugyanazon molekula részei, de nem közvetlenül szomszédosak ugyanabban a molekulában). Tekintsük példaként (11. ábra) két, különböző molekulában levő C—H kötés



11. ábra. Két C—H kötés közötti kicserélődési kölcsönhatások

kicserélődési kölcsönhatását. Az MO leírásnak megfelelően mindegyik C—H kötés egy-egy lokalizált MO-n elhelyezkedő két csatolt spinű elektronnal írható le. Ha a két kötés elég közel kerül, akkor ezen lokalizált MO-k között átfedés jön létre. A helyzet alapvetően ugyanaz, mint két hélium-atom esetén, mint azt az 1. ábra szemlélteti. Az átfedési tartományban a Pauli-féle kizárási elv eredménye-

képp taszítást kapunk. Világos, hogy ez az energia meredeken növekszik, ha a H atomok közelebb kerülnek egymáshoz; továbbá, hogy ez a molekulák lokális tulajdonsága, amely tisztán az egyes protonok körüli elektroneloszlástól függ. Ha megváltoztatjuk a 11. ábrán látható szénatomokhoz kapcsolódó egyéb atomokat, akkor ez csak igen csekély befolyást gyakorol az átfedési tartományra. Ez megmagyarázza,

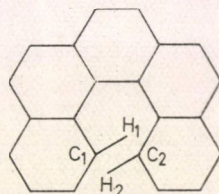


hogy a 7. §-ban tárgyalt Kihara-modell miért oly sokkal jobb, mint a kölcsönhatási energia egyéb kifejezései, ha molekulákat tárgyalunk, nem pedig izolált atomokat.

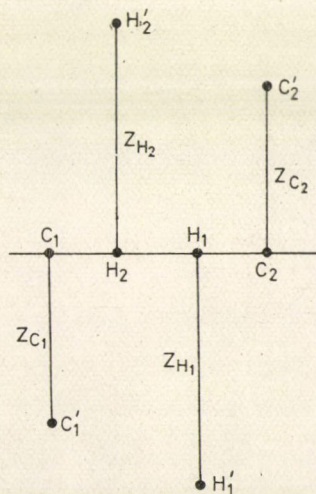
Egy későbbi szakaszban (10. §) kissé alaposabban fogjuk tanulmányozni az atomok keménységét és lágyágát. Mielőtt azonban erre rátérnénk: van néhány érdekes eredmény, melyet az intramolekuláris deformáció tárgyalása kapcsán nyerhetünk, s amely csak az atom van der Waals-rádiuszának gondolatán alapul.

### 9. Molekuláris deformáció; kemény atomok

Tekintsük a dibenzfenantrén nevű (néha pentahelicénnek is nevezett) kondenzált gyűrűs szénhidrogént, melyet a 12. ábra szemléltet. Az jól ismert tény, hogy a kondenzált gyűrűs szénhidrogének síkbeli alak felvételére törekszenek, hogy a  $\pi$ -elektronok delokalizációs energiája maximális legyen. Ha azonban ez a molekula valóban síkbeli lenne, akkor az ábrán megjelölt  $C_1C_2H_1H_2$  atomok rendkívül túlsúfoltan helyezkednének el. A  $C_1C_2$  távolság mindössze  $1,4\text{\AA}$  körül lenne, ami sokkal kisebb, mint a szén VDW rádiuszának kétszerese; a  $H_1$  és  $H_2$  atomok pedig ténylegesen ellenkező oldalra esnének egymáshoz képest, hogy megtarthassuk az észlelt  $1,1\text{\AA}$  körüli értékkel egyező  $C-H$  kötéshosszat. Világos, hogy ez a molekula szükségszerűen nagymértékben eltorzult a sík-konfigurációhoz képest. Kérdésünk a következő: milyen módon jöhet létre torzulás ebben a molekulában úgy, hogy a feszülési energia a lehető legkisebb legyen, s hogy a torzult molekulában az összes nem-kötött atomok legalább olyan távolságra legyenek egymástól, mint van der Waals rádiuszaik összege? A problémát Coulson és Senent [20] tanulmányozták, s kimutatták, hogy sokkal könnyebb a túlsúfoltasból eredő feszültség megszűntetése az összes atomnak az eredeti síkra merőleges irányban történő elmozdításával, mint a síkban történő elmozdítással. Tehát, az eredeti sík mentén tekintve a molekulát (13. ábra), a túlsúfolt tartomány négy atomja áthelyeződik a  $C_1C_2H_1H_2$  helyzetből a  $C'_1C'_2H'_1H'_2$ -be. Ezek az elmozdulások gyakorlatilag nem eredményeznek különbséget a kötéstávolságban, de olyannak kell lenniük, hogy  $H'_1H'_2 = 2,48\text{\AA}$  és  $C'_1H'_2 = C'_2H'_1 \cong (1,5 + 1,2)\text{\AA} = 2,7\text{\AA}$  legyen. Ez az alábbi elmozdulás-értékekhez vezet:  $Z_H = \pm 1,36\text{\AA}$ ;  $Z_C = \pm 1,32\text{\AA}$ . Természetesen azonban ezek a túlsúfolt tartományban bekövetkező elmozdulások a molekula többi részében is elmozdulásokat eredményeznek. Ez utóbbiak ugyancsak az eredeti síkra merőleges irányokban jönnek létre. Minden egyes atomhoz rendelhetünk egy-egy  $Z$  elmozdulást, s ezeket a  $Z_r$ -eket úgy kell megválasztanunk, hogy a teljes feszülési energia minimális legyen, adottnak tekintve, hogy a túlsúfolt tartományban bekövetkező elmozdulások az előbb számított értékűek. Coulson és Senent kimutatják,



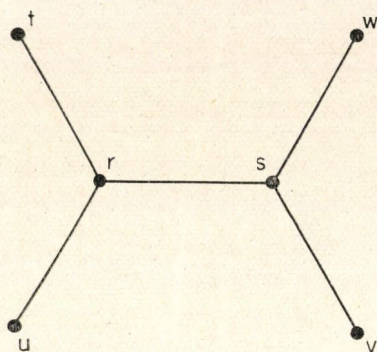
12. ábra. A túlsúfolt pentahelicén molekula,  $C_{22}H_{14}$



13. ábra. Síkból kilépő elmozdulások a túlsúfolt tartományban



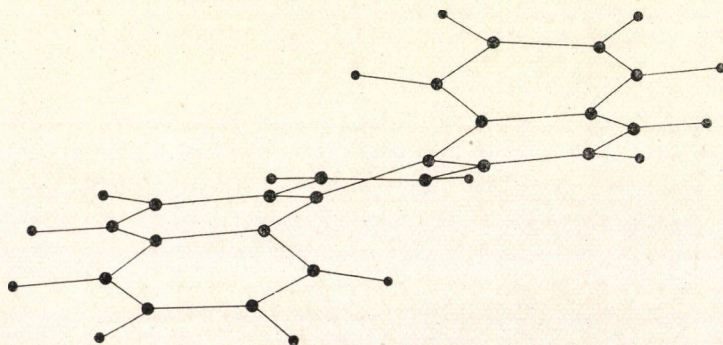
hogy a deformációs energia  $V(Z_1, \dots, Z_{36})$  alakú. Utóbbi két részből áll — az első abból a tényből ered, hogy az egyes szénatomok körüli három kötés-irány többé nem egy síkban fekszik. Tehát a 12. ábra összes szénatomjával kapcsolatban egy nem-síkbeli elhelyezkedésből származó tagnak kell fellépnie. Az



14. ábra. Jelölések a belső energia torziós tagjához

$r$ -edik szénatomra, melyet az  $s, t, u$ -val jelölt más szénatomok vesznek körül, ez a tag:  $\frac{1}{2} k_1 (Z_s + Z_t + Z_u - 3Z_r)^2$ , ahol  $k_1$ : erőállandó. E kifejezésben egyszerű módosításokat kell végezni, ha az atomok közül egy vagy több nem szén-, hanem hidrogénatom. A  $V$  második része a C—C kötések körüli torzióból származik. Olyan C—C kötés esetén, melyet négy szénatom vesz körül, mint a 14. ábra mutatja, a torzióból származó tag  $\frac{1}{2} k_2 (Z_t - Z_u + Z_v - Z_w)^2$ , ahol  $k_2$  egy másik erőállandó. Ennek a kifejezésnek egyszerű módosítását lehet levezetni arra az esetre, ha a  $t, u, v, w$  atomok között egy vagy több hidrogénatom van. A  $k_1$  és  $k_2$  erőállandók számszerű értékét úgy kaphatjuk meg, ha figyelembe vesszük [21] a benzol, etilén vagy naftalin síkból kilépő rezgéseinek számított és kísérletileg nyert frekvenciáit [22].

Ily módon a teljes  $V(Z_1, \dots, Z_{36})$  potenciálfüggvény felírható. A minimum létezésének feltétele egy lineáris egyenletrendszerre vezet, melyből az összes atomhoz tartozó  $Z$ -értékek azonnal megkaphatók. Látható, hogy a molekula egyik oldalán (pl. a 12. ábra bal oldalán) az összes  $Z$ -érték negatív, a másik oldalon pedig az összes  $Z$ -érték pozitív. Ennek eredményeképp a molekula csavarvonalra (helix)



15. ábra. A pentahelicén számított egyensúlyi alakja

hasonlít (innen származik ennek a molekula-családnak a triviális neve, a helicén). A 15. ábra a végső alakot mutatja. Figyelemre méltó, hogy ez az egyszerű eljárás mennyire kielégítő; ugyanis majdnem fedésbe lehet hozni a 15. ábra számított alakzatát a McIntosh, Robertson és Vand [23] által röntgensugár-diffrakció útján kísérletileg észlelt alakokkal. Az elméleti és kísérleti értékek közötti maximális eltérés



(a középsík látszólagos hajlására korrigálva) csupán  $0,18\text{\AA}$ , s ez olyan atomra vonatkozik, amelynek valóságos elmozdulása  $1,71\text{\AA}$ .

Az ily módon számított teljes feszülési energia  $18\text{ kcal/mól}$ . Ez az érték a teljes energiának valószínűleg túlbecslése, mivel ezzel kapcsolatban feltételeztük, hogy a túlsúlyosan elhelyezkedő atomok kemények. Valójában azt várhatjuk, hogy a 13. ábrán megjelölt értékek egy kissé túl nagyok. Így tehát  $V$  redukálódik, viszont akkor hozzá kell adni az előzőekben elhanyagolt tasztító energia-tagot. Ez a tag van der Waals-távolságok esetén zérus vagy esetleg kicsiny negatív érték. Így a végső minimumnak valamivel kisebbnek kell lennie, mint a Coulson és Senent által számított érték [21]. Ha az atomok végtelenül kemények, akkor a Coulson—Senent-féle érték a térbeli feszülés helyes mértéke.

Figyelemre méltó, hogy ilyen típusú molekulákban ezekkel a nem-valencia-erőkkel kapcsolatos egyszerű eljárás is ilyen jó eredményt szolgáltat; továbbá, hogy a molekula végső alakja olyan, hogy a deformáció kiterjed az egész molekulára s nem összpontosul csupán a molekula egy részére (l. a difenil molekulát a 10. §-ban).

#### 10. Lágú atomok; az Eyring—Adrian potenciál

A 9. §-ban részletezett tárgyalásunk megmutatta, mennyire kívánatos szigorúban figyelembe venni az atom keménységét, vagy lágyságát, s így a valóságnak jobban megfelelő kölcsönhatási potenciált kaphatunk, mint a 10. ábrán feltüntetett idealizált potenciál. Egy ilyen potenciális energia-görbe azonnal megmutatja a merev VDW rádiusz használatával járó korlátokat.

Hivatkozunk újra két C—H kötésnek a 11. ábrán szemléltetett kölcsönhatására. Mindegyik C—H tartományban két elektron található, s feltesszük, hogy a kötésképződés eredményként spinjeik erősen csatoltak egymáshoz. Ebből következik, hogy a C—H kötés elektronjai valamelyikének spinje és valamely más — akár ugyanabban, akár egy másik molekulában levő — elektron spinje közötti kapcsolat elég ritkán jön létre. Dirac azonban már a kvantummechanika korai szakaszában kimutatta, hogy a kicserélődési energia egyszerű kapcsolatban van egy adott rendszer elektronjai között létrejövő spin-csatolásokkal. A kicserélődési energiára összefüggést adhatunk meg a tökéletes párosítás-közelítésben [24]. Az elektronokat feloszthatjuk olyanokra, melyek spinjei antiparalel elrendezésben ( $\uparrow\downarrow$ ) párosulnak egymással; olyanokra, melyek paralel elrendezésben ( $\uparrow\uparrow$ ) csatolódnak; s végül olyanokra, amelyek véletlenszerűen csatolódnak. Ha feltehetjük, hogy az egyes saját pályák ortogonálisak, a teljes kicserélődési energia az alábbi alakú:

$$\sum_{\substack{\uparrow\downarrow \text{ csatolt} \\ ij \text{ párokra}}} J_{ij} - \sum_{\substack{\uparrow\uparrow \text{ csatolt} \\ ij \text{ párokra}}} J_{ij} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\text{véletlenszerűen csatolt} \\ ij \text{ párokra}}} J_{ij} \quad (24)$$

A (24) kifejezés értelmezése nyilvánvaló, és a  $H_2$  olyan állapotaival szemléltethető, melyek a két elektron kovalens hozzájárulásából származnak. Teljesen szabályos elemzéssel kimutatható, hogy a

$$\Phi_a(1)\Phi_b(2) \pm \Phi_b(1)\Phi_a(2)$$

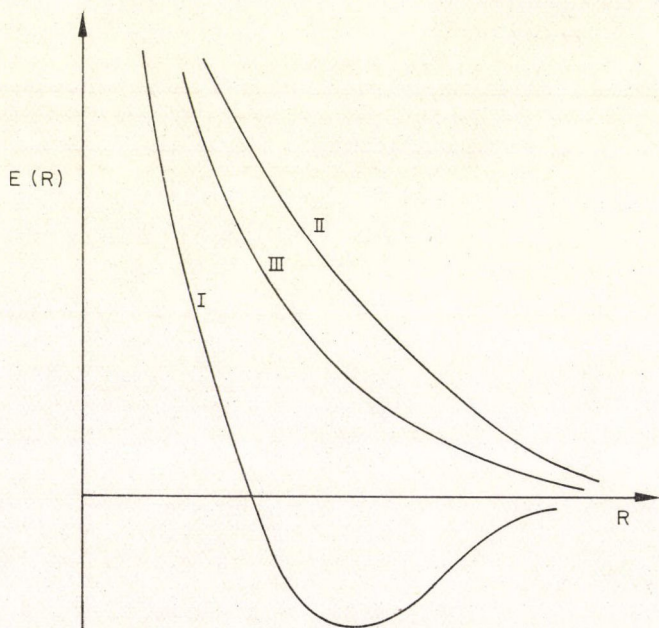
hullámfüggvényekkel — ahol a + előjel a szingulett, a – jel a triplett állapot-



nak felel meg — az energiák a következők:  $E_{\pm} = \frac{Q \pm J}{1 \pm S^2}$ . Itt  $Q$  és  $J$  a Coulomb, illetve kicserélődési energia,  $S = \int \Phi_a \Phi_b d\tau$  pedig az átfedési integrál. Ha feltesszük, hogy a  $Q$  Coulomb-energia  $J$ -hez képest elhanyagolható ( $H_2$ -nél ez a teljes energiának mintegy 14%-a), és hogy  $S$  is elhanyagolható, akkor azt kapjuk, hogy  $E_{\pm} = \pm J$ . Mármost annak, hogy két,  $\alpha$  és  $\beta$  spin kombinációja eredőül triplettet szolgáltatson, háromféle módja van, míg szingulett létrehozására csak egyetlen mód van. Így ha két elektronra az  $\alpha$  és  $\beta$  spin megválasztása teljesen véletlenszerű, akkor az energia  $\frac{1}{4} (+J) + \frac{3}{4} (-J) = -\frac{1}{2} J$  lesz. Ez általánosítható oly módon, hogy minden egyes párra vagy  $+J$ , vagy  $-J$ , vagy  $-\frac{1}{2} J$  értéket kapunk. Így végül a (24) egyenlethez jutunk. Utóbbi megfogalmazásának egy alternatív módja:

$$E_{\text{véletlen spin}}(R) = \frac{1}{4} {}^1E(R) + \frac{3}{4} {}^3E(R) \quad (25)$$

ahol  ${}^1E(R)$  a molekula szingulett, ill. triplett állapotának kölcsönhatási energiái, s annak hipotetikus kötéstávolsága  $R$ . A (25) megfogalmazás előnye, hogy — feltéve, hogy empirikus  $E(R)$ -et használunk — automatikusan számításba vesszük a Coulomb-tagokat. Némileg számításba vesszük az  $S$  átfedési integrált is, bár ez még az elmélet gyenge oldala marad.



16. ábra. A „véletlen-spin” kölcsönhatás két hidrogénatom között  
I. görbe: az  ${}^1\Sigma_g$  szingulett szint  
II. görbe: a  ${}^3\Sigma_u$  triplett szint  
III. görbe: a „véletlen-spin” energia görbéje



Ha két hidrogénatom kölcsönhatását tárgyaljuk, akkor  ${}^1E(R)$ -et és  ${}^3E(R)$ -et spektroszkópiai úton megkaphatjuk. Ekkor, mint a 16. ábra mutatja, kapunk egy véletlenszerű spinálláshoz rendelhető kifejezést. Ez azonban éppen az az  $E(R)$  függvény, amelyet a két C—H kötés esetében — l. 11. ábra — megkívánunk. Így most már felvehetünk egy (25) alakú kifejezést a szomszédos molekulákban levő két hidrogénatom taszítási energiájára vonatkozóan.

Bizonyítható, hogy a kölcsönhatásnak tisztán valencia-kötésként történő számításbavétele nem szükségszerűen a legjobb, különösen poláris kötések esetén. Tehát hivatkozunk ismét a 11. ábrára, és tegyük fel, hogy a bal oldali kötést a  $\chi_a^2 MO$  hullámfüggvény reprezentálja, ahol  $\chi_a = (c_a + \lambda h_a)/N$ ;  $N^2 = 1 + \lambda^2 + 2\lambda S_{ch}$ . Hasonló kifejezés létezik a jobb oldali,  $\chi_b^2$ -tel reprezentált kötésre nézve. Itt a C—H kötés polaritását a  $\lambda$  koeficiens jelzi. Azt mondhatjuk, hogy a  $H_a$  atom  $Q_H$  töltése  $\frac{2\lambda^2}{N^2}$ , a  $C_a$  atomé pedig  $\frac{2}{N^2}$ . A maradék töltéssel, azaz  $2\lambda c_a h_a/N^2$ -tel a kötés rendelkezik. Természetesen azonban a töltésnek csak a  $H_a$  atomhoz tartozó része van elég közel a második C—H kötéshez, hogy jelentékeny kicserélődési erőket válthasson ki. Ha a két C—H kötést egyetlen rendszernek tekintjük, az egyesített hullámfüggvény egyetlen  $4 \times 4$ -es determináns, a  $\chi_a(1)\bar{\chi}_a(2)\chi_b(3)\bar{\chi}_b(4)$  átlós taggal, ahol a felülvonás  $\beta$  spint jelöl. Alapvető módszerek alkalmazásával az alábbi kicserélődési energiát kapjuk:

$$-2 \int \chi_a(1)\chi_b(2) \frac{1}{r_{12}} \chi_b(1)\chi_a(2) d\tau_1 d\tau_2.$$

Behelyettesítve  $\chi_a$  és  $\chi_b$  kifejezését, s kiválasztva az egyedüli jelentős tagokat, láthatjuk, hogy ez a következő alakban írható:

$$-\frac{2\lambda^4}{N^4} \int h_a(1)h_b(2) \frac{1}{r_{12}} h_b(1)h_a(2) d\tau_1 d\tau_2.$$

De mivel  $Q_H = 2\lambda^2/N^2$ , ez egyszerűen  $-\frac{1}{2}Q_H^2 J_{HaHb}$  alakú. Ez adja meg a kicserélődési kölcsönhatás alapvető eredményét olyan esetekben is, mint a poláris kötéseké.

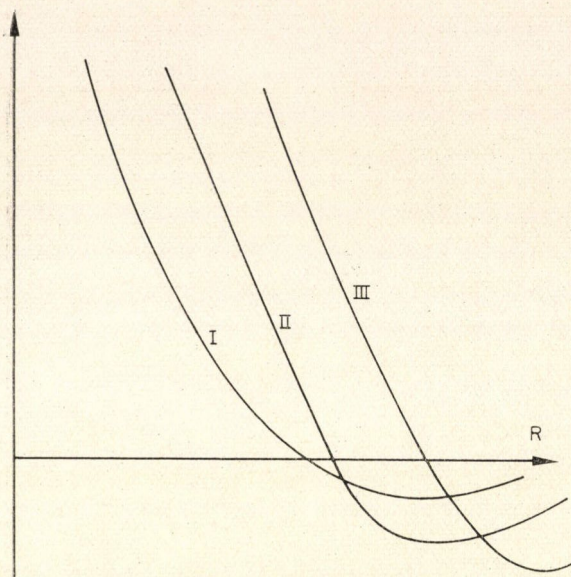
Ha a  $H_2$ -re megállapított szingulett és tripllett energiákat használjuk, s figyelmen kívül hagyjuk a C—H kötések polaritását, akkor a nem-valencia kölcsönhatásnak a 16. ábrán látható energiagörbét kapjuk. Ilyen görbét először Eyring [25] javasolt egy tanulmányában, mely az etán C—C kötése körüli szabad rotáció gátjára vonatkozó lehetséges mechanizmusokat tárgyalja; de ezt később ebben a vonatkozásban felelevenítette Adrian [26], továbbá Coulson és Stocker [27]. Williamsnek [28] egy még újabbkeletű, 100 különböző szénhidrogén-molekulakristályra történő empirikus illesztése lehetővé tette, hogy a mindeddig elérhető legjobb közelítéseket kapja. Williams a teljes kölcsönhatást az alábbi alakban veszi fel:

$$V(R) = AR^{-6} + Be^{-CR} \quad (26)$$

és megadja az  $A, B, C$  alapvető paraméterek értékét C—C, C—H és H—H kötések esetén. Megemlítjük, hogy a taszító tagot exponenciális alakúnak veszi fel. Williams görbéit a 17. ábra szemlélteti. Ezek  $R$  csökkenésével a várható meredek emelkedést



mutatják, de az nyilvánvaló, hogy ez a növekedés nem elég meredek ahhoz, hogy merev VDW rádiuszra következtethessünk. Tehát az atomok részlegesen lágyak, s ezen belül a hidrogén-atom lágyabb, mint a szénatom. Feltételezhetően a C atom-



17. ábra. Williams kölcsönhatási energia-görbéi

- I. H...H kölcsönhatás
- II. C...H kölcsönhatás
- III. C...C kölcsönhatás

nak a H-hez képest nagyobb keménysége annak a ténynek a következménye, hogy a valenciahéjban egy helyett négy elektron található, így tehát egyik esetben nagyobb taszító kicserélődési kölcsönhatás lép fel, mint a másikban. Azoknál a távolságoknál, ahol a két kölcsönhatási energia zérus, a C—C és H—H görbék meredekségei közelítőleg úgy aránylanak, mint 7 az 1-hez. Ez a szénatomot jelentős mértékben keményebbé teszi a hidrogén-atomhoz képest.

Az igazság kedvéért hozzá kell tennünk, hogy már sok egyéb módon választották meg a vonzó és taszító hozzájárulásokat a (26) alakon kívül. Coulson és Haigh [29] nagy számú H...H potenciált közölt, Hendrickson és társai [30, 31] pedig igen sok C...C, C...H és H...H potenciált adtak meg, melyek közül a legvalószínűbbeknek valamivel ki-

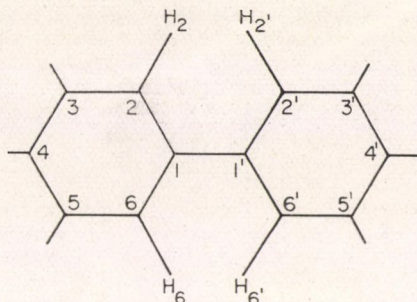
sebb távolságoknál van minimumuk, mint Williams [28] görbéinek. Abe, Jernigan és Flory [32] még egy sorozatot jelöltek meg, mely jó eredményeket szolgáltat a *n*-alkánok konformációs energiájára. Az még nem tisztázott, hogy ebből a sokféle potenciálból melyek a legjobb választható értékek. Szerencsére azonban az összes különböző görbe alapvetően ugyanolyan alakú.

### 11. Lágy atomok; intramolekuláris deformáció

Most szemléltetni fogjuk a H...H, H...C és C...C nem-kötött atomok ezen potenciáljainak a használatát, adott molekulák alakjának tárgyalásánál. A molekula alakját gyakran nagyrészt valenciaerők határozzák meg. A benzol esetében a molekula merev, s nem marad belső szabadsági foka. Gyakran azonban megvan a lehetősége a belső rotációnak, vagy ha a túlszűfoeltság foka igen erős, akkor eltérések lehetnek a szabályos valencia-szögektől. Ezeket a molekulán belüli rotációkat és egyéb deformációkat a nem-valenciaerők szabják meg, melyeket már tanulmányoztunk. A teljes energiának az előnyben részesített konformációban minimuma van. Így, egy későbbi tárgyalásnak elébevéágva, — annak, hogy a ciklohexánnak rendesen a szék-forma a stabil formája, az az oka, hogy ha megengedett mindenfajta hozzájárulás a ciklohexán belső energiájához, akkor ez az alak, amelynél a belsőener-



giának minimuma van. Amikor a különböző hozzájárulásokat összegezzük a teljes belsőenergiává, fontos, hogy ne feledkezzünk meg egyetlen összetevő részről sem. Ezek a következők: {1} töltés-töltés és egyéb tisztán elektrosztatikus erők, {2} polarizációs erők, {3} diszperziós erők és {4} taszító kicserélődési erők. Az alkánokban található C—C kötések körüli gátolt rotáció fellépte esetén kíváncsiak még [32] egy külön tagot hozzáadni az energiához, amely ennek a fentemlített kötéssel együttjáró rotációnak a folyománya. Ez azért látszik szükségesnek, mert még nem ismerjük ennek az erőnek a pontos eredetét. Ez utóbbi erőre vonatkozóan felvehetünk egy  $E(\Phi) = \frac{1}{2} E_0(1 - \cos 3\Phi)$  alakú energia-változást, ahol  $\Phi$  jelöli a nyitott (staggered) konformációból kiinduló rotáció szögét. Az ilyen belső rotáció  $E_0$  potenciál-gátjához gyakran rendelhető egy 2,8 kcal/mól körüli érték.



18. ábra. Jelölések a difenil molekulához

Első példánk [25, 33] a difenil (18. ábra).

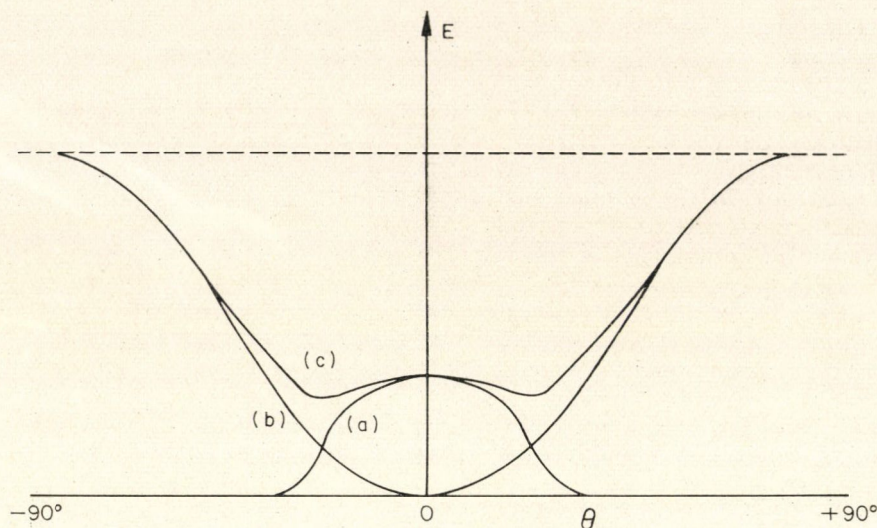
Ha ez a molekula síkbeli, akkor a  $H_2H_2'$  és  $H_6H_6'$  távolságok megegyeznek, s értékük mintegy 1,8 Å. Ez sokkal kisebb a 2,4 Å-ös normál van der Waals távolságnál, és összesen 1 eV nagyságrendű taszítási energiára vezet. Ezt a feszülést több különböző módon lehet csökkenteni. Például

- növelhetjük a  $C_1-C_1'$  kötéstávolságot mintegy 0,6 Å-mel;
- csökkenthetjük a  $C_2-H_2$  stb. távolságokat, a vegyértékszög változtatása nélkül;
- növelhetjük a  $C_1C_2H_2$  stb. szögeket, úgy hogy a molekula síkbeli maradjon;
- a  $C_2-H_2$  kötést a sík fölé hajlíthatjuk, a  $C_2H_2'$ -t pedig a sík alá, úgy hogy a molekula összes többi része a síkban maradjon;
- a molekula egyik felét elforgathatjuk a  $C_1C_1'$  körül, anélkül, hogy a másik fél helyzete megváltoznék.

Általában a fenti elmozdulásoknak a kombinációját várhatjuk. Azok az elmozdulások, amelyek egymagukban nagy energiát igényelnek, várhatóan igen kicsiny (vagy egyes esetekben zérus) hozzájárulást adnak az eredő deformációhoz. Mármost a szereplő energiák durva becslése [33], a tipikus molekuláris erőállandókat használva, azt mutatja, hogy csak az e) típusú elmozdulás jelentékeny nagyságú. A sorban következő legkönnyebben végbemenő deformáció a c), bár ez néhány esetben ugyanannyi energiát igényel, mint e). Így arra következtethetünk, hogy e) képviseli a domináns deformációt. Meg kell tehát határoznunk az elcsavarodás szögét, egy hipotetikus síkbeli molekulában a  $\Phi = 0$  esetre vonatkoztatva, úgy hogy a teljes energia minimális legyen.

A helyzetet a 19. ábra mutatja. A taszító feszülési energiát a rezonancia-energia-vesztéssel összegezve — mely utóbbi akkor lép fel, ha  $\Phi$  nő és így, mivel a két fenil csoport nincs többé közös síkban, a rezonancia csökken —, az (1) teljes energiagörbét kapjuk. Utóbbi nagyon lapos, így tehát igen nehéz a minimum pontos helyzetét megállapítani. Számításaink ez esetben  $\Phi = 25^\circ$  értéket szolgáltattak. Ez azonban meglehetősen közel van az *Almendingen* és *Bastiansen* [34] által kísérleti úton — gázfázisban elektron-diffrakciós technikát alkalmazva — kapott



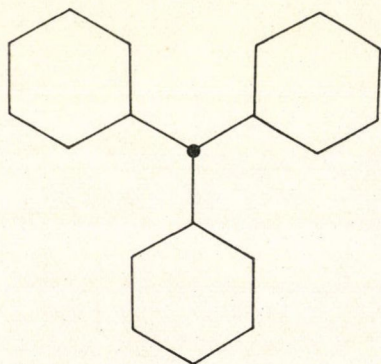


19. ábra. A difenil teljes energia-görbéi

- (a) a H...H tasztításokból származó feszülési energia  
 (b) a rezonancia-energia-görbe, mely a két gyűrű által bezárt szögtől függ  
 (c) a teljes energia

$\Phi = 41^\circ \pm 2^\circ$  értékhez. Nem meglepő, hogy ha az orto-helyzetű hidrogénatomokat terjedelmesebb szubsztituensekkel helyettesítjük, akkor az elcsavarodás szöge nő, és mint például az *o*-terfenil esetében, elérheti a  $90^\circ$ -ot.

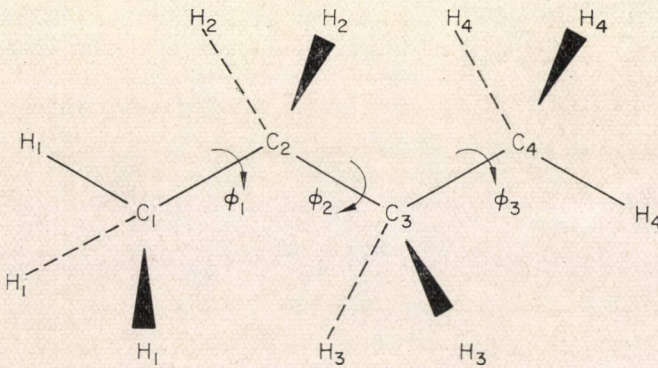
Adrian [26] a híres trifenil-metil gyököt is megvizsgálta (20. ábra), amely a Gomberg-reakcióban fordul elő. Ha a  $(C_6H_5)_3C-C(C_6H_5)_3$  hexafenil-etán két ilyen gyökre disszociál, mindkét különálló részben lehetőség nyílik a fokozott  $\pi$ -elektron-rezonanciára. A difenil esetében elmondottak azonban még fokozottabban érvényesek a  $C(C_6H_5)_3$ -nál, s így a szokásos feltételezéssel ellentétben, ez a gyök nem síkbeli elrendezésű. A részletes vizsgálat azt mutatja, hogy mindegyik gyűrű rotációt végez az őt a centrális szénatomhoz kapcsoló kötés körül. Ez a három szög egyenlő és azonos értelmű, így a gyök egy dugattyús repülőgép légszárnyára emlékeztet. Ha a rotáció szöge  $\theta$ , meg lehet adni az  $E$  teljes energia  $\theta$  szögtől való függésének görbét. Ez hasonlít a difenil megfelelő görbéjéhez a 19. ábrán, s körülbelül  $\theta = 30^\circ$ -nál ad minimumot.



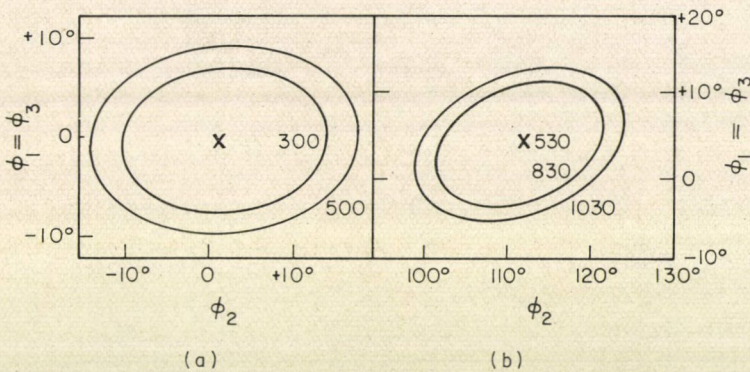
20. ábra. A trifenilmetil gyök

Utolsó példánk egy ilyenfajta vizsgálatra: egy paraffin-lánc konformációjának problémája. Ez az utóbbi években készített sok ilyen típusú munka tipikus problémája. Tekintsük a *n*-bután molekulát (21. ábra). A  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  szögek az antiparalel formából kiinduló rotációt jelölnek, mint az ábra mutatja. Így a  $g^\pm$  „gauche” (szin-ferde) helyzethez a  $\Phi = \pm 120^\circ$  értékeket rendeljük. Elő-



21. ábra. Jelölések a *n*-bután molekulához

ször tekintsük az energiát az antiparalel konfiguráció körüli  $\Phi_1 (= \Phi_3)$  és  $\Phi_2$  szögek függvényében [32]. A 22a ábra azt mutatja, hogy a minimum valóban  $\Phi_1 = \Phi_2 = 0$ -nál van, és meg lehetősen jól meghatározott. Ezután tekintsük a „gauche” helyzetet, melyhez a  $\Phi_1 = \Phi_3 = 0$ ,  $\Phi_2 = 120^\circ$  szögértékek tartoznak. A

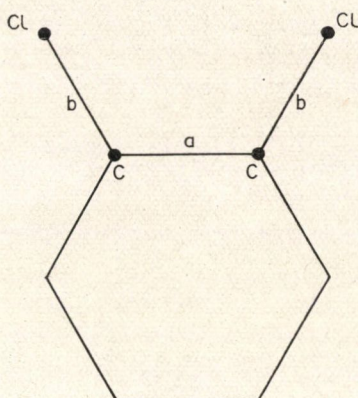
22. ábra. A *n*-bután energia-kontúrgörbéi (Abe, Jernigan és Flory [32] nyomán)

minimum (22b ábra) a  $\Phi_1 = \Phi_3 = 4^\circ$ ,  $\Phi_2 = 112,5^\circ$  értékeknél van, kiváló egyezésben a  $\Phi_2 = 112,5^\circ \pm 1,1^\circ$  kísérleti értékkel. A legstabilabb antiparalel alakból a metastabil „gauche” alakba való átmenet gátmagasságának részletes vizsgálata 3,6 kcal/mól-os elméleti értéket ad, szintén kitűnő egyezésben az ezen mennyiségre kapott 3,3, 3,6 és 3,7 kcal/mól-os kísérleti értékekkel.

## 12. Síkban maradó és síkból kilépő deformációk; a kritikus erő-elmélet

Amikor a 11. §-ban a difenilt tárgyaltuk, könnyen elhanyagolhattuk a síkban maradó deformációkat a gyűrűk egymáshoz viszonyított rotációja mellett. Vannak azonban olyan esetek, melyekben a két egymás mellett jelen levő deformációtípus





23. ábra. Jelölések  
a hexaklórbenzolhoz

mélyrehatóbb vizsgálata szükséges. E vizsgálatot a hexaklórbenzollal (23. ábra) kezdjük [27]. A feltüntetett jelöléseket használva, a molekula túlsúfolt, ha  $a + b$  kisebb, mint a klór VDW rádiuszának kétszerese. Kísérleti értékek:  $a + b = 3,12 \text{ \AA}$ ;  $2r_{VDW} = 3,60 \text{ \AA}$ . Tehát túlsúfoltság áll fenn. A túlsúfoltság megszüntetésének három módját gondolhatjuk el. Vagy  $a$ ) a C—C kötések hosszát növeljük  $\Delta a$ -val, vagy  $b$ ) a C—Cl kötések hosszát növeljük  $\Delta b$ -vel, vagy  $c$ ) a C—Cl kötések felváltva fölé, illetve alá hajlítjuk a szénatomok síkjának egy  $\Delta\theta$  szöggel, ami hullámos alakot ad a molekulának. Az  $a$ )-hoz tartozó energia  $6 \cdot \frac{1}{2} k_1 (\Delta a)^2$ ; a  $b$ )-hez tartozó:  $6 \cdot \frac{1}{2} k_2 (\Delta b)^2$ ; a  $c$ )-hez tartozó pedig  $6 \cdot \frac{1}{2} k_\theta (\Delta\theta)^2$ ; ahol  $k_1, k_2, k_\theta$ : erőállandók. Mármint legyen  $V(R)$  a két,  $R$  távolságban levő Cl-atom között ható nem-valenciaerő, és hanyagol-

juk el az összes ilyenfajta kölcsönhatást a közvetlenül szomszédos atomokén kívül.

Először rögzítsük  $a$  és  $b$  értékét, és tekintsük  $\theta$ -nak  $\theta = 0$ -tól (síkbeli alak)  $\theta = \Delta\theta$ -ig (hullámos alak) történő változtatásának hatását. Trigonometrikus úton könnyen kimutathatjuk, hogy e deformáció esetén

$$R^2 = (a + b)^2 + (3b^2 - ab)(\Delta\theta)^2 + \Delta\theta \text{ magasabb hatványai;}$$

így tehát felírhatjuk:

$$\Delta R = \frac{3b^2 - ab}{2(a + b)} (\Delta\theta)^2.$$

A Cl...Cl energiában bekövetkezett változás:

$$6 \cdot \delta V = 6 \cdot \frac{\partial V}{\partial R} \Delta R = 6 \cdot \frac{3b^2 - ab}{2(a + b)} \frac{\partial V}{\partial R} (\Delta\theta)^2.$$

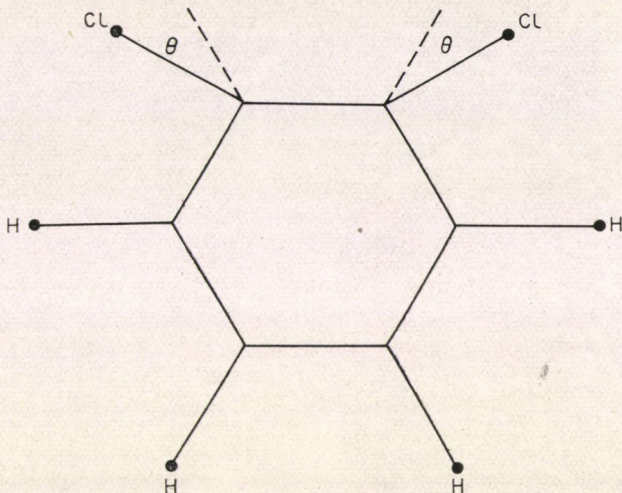
Ahol túlsúfoltság áll fenn, ott  $\frac{dV}{dR}$  negatív, s így a Cl...Cl kölcsönhatás  $-6 \cdot \frac{1}{2} k_0 (\Delta\theta)^2$  alakú negatív energiát kell hogy eredményezzen, ahol

$$k_0 = \frac{3b^2 - ab}{a + b} \left| \frac{dV}{dR} \right|.$$

Így tehát a fenti  $c$ ) energiatag  $6 \cdot \frac{1}{2} (k_0 - k_\theta) (\Delta\theta)^2$  lesz. Ha a túlsúfoltság olyan erős, hogy  $k_0 > k_\theta$ , azaz  $\left| \frac{dV}{dR} \right| > \frac{a + b}{3b^2 - ab} k_\theta$ , akkor ebből következik, hogy a sík-konfiguráció nem stabil, és a molekula hullámos alakúvá torzul. Ha azonban  $k_0 < k_\theta$ , akkor — mint Coulson és Stocker kimutatták — az energiának  $\Delta\theta = 0$  esetén lesz minimuma. Tehát ha a Cl...Cl taszítás nem túl erős, akkor az eredő deformáció a síkban marad. Ha azonban ez a taszítás eléri egy kritikus értéket, akkor a jelentősebb deformáció síkból kilépő lesz. Coulson és Haigh [29] tovább-

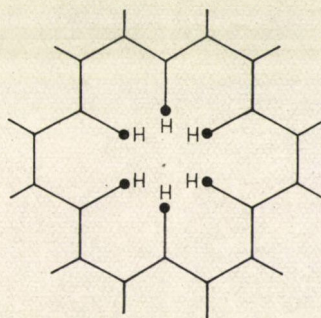


vitték ezt a gondolatmenetet és általánosan bizonyították a következő elvet: Tegyük fel, hogy egy síkszerkezetű aromás molekulában vannak olyan atomok, melyek közt nincsen kötés (mint pl. a  $C_6Cl_6$  klóratomjai). Először tegyük fel, hogy ezek kölcsönhatása zérus. Ekkor a molekula biztosan síkbeli. Ezután gondoljuk el, hogy a nem-valencia kölcsönhatások fokozatosan nőnek, mégpedig mindegyik a végső értékének megfelelő arányban. Először a molekula síkbeli marad, és az atomok megfelelő módon elmozdulnak a molekula síkjában, úgy, hogy a feszülési energia minimális legyen. A kölcsönhatás folyamatos növekedtével azonban bekövetkezik egy olyan állapot, amely után a síkbeli elmozdulások közelítőleg állandó értékűek maradnak, viszont síkból kilépő elmozdulások lépnek fel, és állandóan növekednek a végső értékük eléréséig.



24. ábra. Az o-diklórbenzol

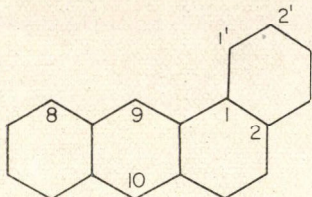
Ennek a kritikus kölcsönhatásnak a létezése fontos tény, mert ez határozza meg, hogy a deformáció teljesen a síkban történik-e (amikor is rendszerint kicsiny marad), vagy a síkból kilép-e (amikor is többnyire nagymérvű lesz). Ezek után világos, hogy a 9. §-ban, a pentahelicén alakjára vonatkozó korábbi vizsgálatunkban azért összpontosíthattuk a figyelmünket a síkból kilépő deformációkra, mert annak feltételezésekor, hogy a hidrogénnek jól meghatározott van der Waals-rádiusza van, implicit módon azt is föltettük, hogy túlhaladtuk a kritikus pontot. Ez azonban nem mindig történik meg. Az o-diklórbenzol esetében a végső deformáció a síkon belül marad, mint azt a 24. ábra mutatja. Viszont a Sondheimer-molekulában, a [18]-annulénben, melyet a 25. ábra mutat, a H atomok centrális csoportja úgy mozdul el, hogy hullámos molekulát kapunk eredményül, melyben a hidrogénatomok váltakozva körülbelül  $0,11\text{\AA}$ -mel mozdulnak el a sík alá, ill. fölé, azok a szénatomok pedig, melyekhez csatlakoznak, mintegy  $\pm 0,06\text{\AA}$ -mel vagy egy kissé többel mozdulnak el.

25. ábra. A [18]-annulén,  $C_{18}H_{18}$

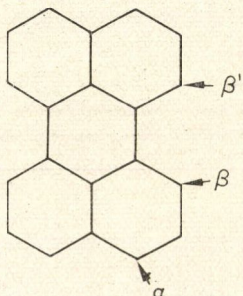


### 13. Az ultraibolya spektrumokra és a kémiai reakciókra történő alkalmazások

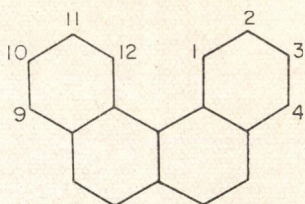
Ha az előbb leírt típusú taszítóerők léteznek a nem-kötött atomok között, akkor sok különböző jelenségben kell rájuk vonatkozóan bizonyítékot találnunk. Az egyik ilyen jelenségcsoport a kémiai reakciókészség területe, különösen pedig a konjugált kondenzált gyűrűs szénhidrogéneké, mint pl. a benzantracén (26. ábra). *Dallinga, Smit és Mackor* [35] azt találták, hogy folyékony HF-ban a molekula a 9. helyzetben addicionál protonokat. Ez nem egyezik azzal, amit várnánk, mivel ez a helyzet részlegesen árnyékolt, s így várhatóan kevésbé reakcióképes, mint a 10. helyzet. A magyarázat abban keresendő, hogy az átmeneti állapot könnyebben elérhető, ha a



26. ábra. Az 1,2-benzantracén



27. ábra. A perilén,  $C_{20}H_{12}$ , reakcióképes helyzetei



28. ábra. A benzofluorantén

$C_9$ -et éri „támadás”, mint ha a  $C_{10}$ -et. Ennek oka az, hogy a reakció megindulása előtti síkbeli helyzetben a  $C_9$ -hez kapcsolódó proton belül van a  $C_1$ -höz kapcsolódó proton van der Waals-távolságán. A  $C_9$ -hez tartozó protonra tehát taszítás hat, bár a 12. §-ban részletezett gondolatmenet azt sugallja, hogy a kritikus feltétel valószínűleg még nem teljesül, s így a molekula síkbeli marad. Hogy azonban a Wheland-típusú közbülső alakot létrehozassuk, ki kell hajlítanunk a  $C_9-H_9$  kötést a síkból úgy, hogy az érkező proton új kötéssel tudjon kapcsolódni  $C_9$ -hez. A kötésnek a síkból való kihajlítása energiát igényel, de ha már a  $C_1$ -höz tartozó proton jelentős feszülést szolgáltat, akkor ez az energia némileg csökken. Így tehát a 9. helyzetben az aktivációs energia kisebb, mint a 10. helyzetben, ahol nincs ilyen, szomszédos protontól származó túlsúfoltság.

Hasonló példát találhatunk a perilén rendszerénél (27. ábra). Általános elvek alapján az  $\alpha$  helyzetben várnánk reakciókészséget. A ténylegesen végbenemő reakcióknál a túlsúfolt  $\beta$  helyzet előnyben részesül, ahol a szomszédos  $\beta'$  helyzetű hidrogéntől származó taszítóerők a reakció hajtóerejének részét képezik. Néhány egyéb példát ad meg *Levy, Newman és Szwarc* [36] a benzofluoranténre (28. ábra), amikor is azt szabad gyökök, úgymint  $CH_3$ ,  $CCl_3$ , „támadják”. Ha a 2. helyzetbe egy metil-csoport kerül, akkor a támadás sebességében erős változás következik be (az 1. vagy 12. helyzetekben). Ha azonban a  $C_1$ -hez kapcsolódik egy metil-csoport, akkor ez a sebesség közelítőleg megkétszereződik; ha pedig két metil-csoport kapcsolódik, a  $C_1$ -hez és a  $C_{12}$ -höz, akkor ismét nagyjából megkétszereződik.

Utóbbi két esetben már valószínűleg túljutottunk a 12. §-ban említett kritikus ponton, s így a  $C_1H_1H_{12}C_{12}$  körüli tartományban fennálló erős túlsúfoltság a sík elrendeződés megszűnéséhez vezet. Ezt a következtetést megerősíti a következő, meglehetősen leegyszerűsített gondolatmenet [37].



A pentahalicénre (15. ábra) vonatkozó előbbi tanulmányunkban láttuk, hogy ha a molekula spirál-alakúvá deformálódik, akkor a deformáció kiterjed az egész szénvázra, s nem lokalizálódik valamely kötésre. Ha feltesszük, hogy a sík formától való eltérés egyenletes, akkor a Hückel-féle molekulapálya elméletben szereplő alapvető  $\beta$  rezonancia-integrál redukálódik. Tegyük fel, hogy  $\beta$  az 1-metil, ill. 1,12-dimetil vegyületek esetén rendre  $\beta'$ -be, ill.  $\beta''$ -be megy át. A szerző már kimutatta [38], hogy egyszerű kapcsolat van az  $r$  helyzetben bekövetkező szabad gyök-támadás sebessége és az  $E_r$  lokalizációs energia között, amely ahhoz szükséges, hogy egy  $\pi$ -elektront az  $r$  helyzetben lokalizáljunk, s hogy ezt a helyzetet teljesen kimozdítsuk a rezonáló vázból. A metilezés sebességének változásából visszafelé következtethetünk az  $E_r$  változására; ez viszont megadja az új  $\beta'$ , ill.  $\beta''$  értéket. A 28. ábrán szemléltetett benzfenantrén molekulára kísérletileg észlelt sebességekkel való megfeleltetés miatt fel kell tételeznünk, hogy  $\beta' = 0,982\beta$ ;  $\beta'' = 0,966\beta$ . Ez annak felel meg, hogy a dimetil molekulában majdnem kétszer akkora az elcsavarodás, mint a monometil molekulában, pontosan úgy, ahogy vártuk is.

Van azonban még egy ellenőrzési lehetőség, amely e molekulák u.v. abszorpciójával kapcsolatos. Ha a rezonancia-integrál megváltozik, akkor az abszorpció sávok energiája is megváltozik, mégpedig ugyanabban az arányban. Mr. R. J. R. Hayward [39] a 2815, 2865, ill. 2920 Å-ös észlelt sávok felhasználásával következtetett a  $\beta'_{spec.} = 0,984\beta$ , ill.  $\beta'' = 0,966\beta$  értékekre. Ezen számoknak a reakciósebességekből számított értékekkel való majdnem tökéletes megegyezése kellemes megerősítést nyújt arra nézve, hogy az általános gondolatmenet és az értelmezés helyes. Említésre méltó, hogy ily módon kapcsolatot tudunk megállapítani a nem-valencia-erők, valamint az u.v. spektrumok és a reakcióképesség között.

#### 14. A nem-valencia-erők additivitása, ill. nem-additivitása

A kicserélődési taszító erők, melyek elsősorban felelősek a VDW rádiusz létezéséért, rövid hatótávolságúak és lokalizáltak. Emiatt várható, hogy nagyfokú additivitást mutatnak. Így, sok esetben, az  $A$  atom (vagy molekula) és két másik,  $B$  és  $C$  rendszer közötti kölcsönhatási energia pontosan megegyezik az  $A$  és  $B$ , valamint  $A$  és  $C$  között külön-külön létrejövő kölcsönhatások összegével. Továbbá, ha  $A$  nagy molekula, akkor ennek valamely másik,  $B$  rendszerrel fennálló taszító kölcsönhatását úgy kezelhetjük, hogy  $A$ -t lokalizált egységekből — többnyire atomokból vagy kötésekből — összetettnek tekintjük, s az egyes hozzájárulásokat egyszerűen összegezzük.

Ez a módszer azonban nem mindig teljesen kifogástalan. Például felléphetnek mind vonzó, mind taszító jellegű háromtest-erők. Foglalkozzunk előbb a taszító erőkkel. Ezekre vonatkozóan végeztek néhány számítást a nem-összegezhetőség kimutatására. Az egyik legjobb ilyen számítás a Shortak-é [40], aki egy egyenes mentén szimmetrikusan elhelyezkedő három héliumatomot vizsgált, és közvetlen numerikus számítással azt kapta, hogy ha a szomszédos atomok távolsága mindössze 0,93 Å, akkor az additivitási törvénytől kb. 30%-os eltérések lépnek fel. A 4. §-ban jelzett, Salemtől [2] származó gondolatmenetnek az alábbi egyszerű kiterjesztése azonban megvilágítja ezek természetét.

Tekintsünk (29. ábra) egy  $R$  oldalú egyenlőoldalú háromszög csúsaiban elhelyezkedő három héliumatomot ( $A, B, C$ ). Hat elektronjuk az alapállapotban

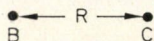


$a + wb + w^2c$  alakú molekulapályákon helyezkedik el, ahol  $w = 1, e^{\frac{2\pi i}{3}}, e^{\frac{4\pi i}{3}}$ , s ahol  $a, b, c$  rendre az  $A, B, C$ -hez tartozó 1s atomi pályákat jelöli. Most már a valamely pontban jelentkező teljes sűrűség,  $\varrho_{abc}$ , egyszerűen számítható.

$$\begin{array}{c} A \\ \bullet \end{array} \quad \varrho_{abc} = \frac{(a^2 + b^2 + c^2)(1 + S) - 2S(ab + bc + ca)}{1 + S - 2S^2}, \quad (27)$$

ahol  $S = \int ab \, d\tau$  az átfedési integrál.

Hasonló módon, ha csak két atomot —  $A$  és  $B$  — tekintünk:



29. ábra  
Három  
héliumatom  
kölsönhatása

$$\varrho_{ab} = \frac{a^2 + b^2 - 2Sab}{1 - S^2} \quad (28)$$

A Hellmann—Feynman-elv alapján viszont az  $A$  atomra ható erő a (2)-höz hasonló egyenlettel adható meg, ahol  $\varrho_{abc}$  a sűrűség. Így az  $A$ -ra ható 3-test-erőt úgy kaphatjuk meg, hogy az erőhatást a  $\varrho_{abc} - \varrho_{ab} - \varrho_{ac}$  sűrűséggel számítjuk. Ennek az erőnek az integrálja  $R' = \infty$ -tól  $R' = R$ -ig megadja az egyenlőoldalú konfigurációhoz tartozó háromtest-energiát. Az pedig (27) és (28) alapján könnyen kiszámítható, hogy az  $A$ -ra ható erő számításában szerepet játszó  $\varrho_{abc} - \varrho_{ab} - \varrho_{ac}$  éppen a következő:

$$\frac{S}{(1 - S^2)(1 + 2S)} \{-2bc + S(b^2 + c^2 - 2bc + 2ab + 2ac)\}. \quad (29)$$

Éppúgy, mint a 4. §-ban, ez az erő csak akkor tűnik el, ha  $S = 0$ . A (29) összefüggést nem nehéz alkalmaznunk [41] az erő és innen az energia meghatározására. (29) alakjából világosan látszik, hogy ez a 3-test-energia maga is exponenciális alakú, mint a megfelelő kéttest-erő is. A kicserélődési kölcsönhatásra jelenleg dolgoztak ki egy perturbációs eljárást *Jansen* és *Lombardi* [42], valamint *Jansen* [43], s a perturbációszámítást a másodrendű tagokig végezték el. Kísérleti szempontból azt várhatjuk, hogy a kicserélődési háromtest-erők a folyadékokban, kristályokban, valamint a gázok harmadik viriál-koefficiensében —  $C(T)$  — jutnak jelentős szerephez. *Rowlinson* [44] kimutatta, hogy a  $C(T)$  függvény lefutásában van egy csúcs, amelyet nem egykönnyen lehet megmagyarázni olyan típusú pár-potenciállal, amely kielégíti a  $B(T)$  második viriál-koefficiens követelményeit is. Folyadékokban lehetségesek szabályos 3-test-ütközések. A teljes vizsgálat azonban még így is túl nehéz, és csak úgy lehetséges [45], ha olyan effektív kéttest-potenciálokat —  $\sum_{i,j} V_{ij}^{\text{eff}}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$  —

keresünk, melyek a lehető legjobban megközelítik a helyes intermolekuláris potenciált. Tehát megpróbáljuk  $V^{\text{eff}}$ -et a következő alakban keresni:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \equiv \sum_{i < j} V_{ij} + \sum_{i < j < k} V_{ijk} + \dots = \sum_{i < j} V_{ij}^{\text{eff}}(\vec{r}_i - \vec{r}_j).$$

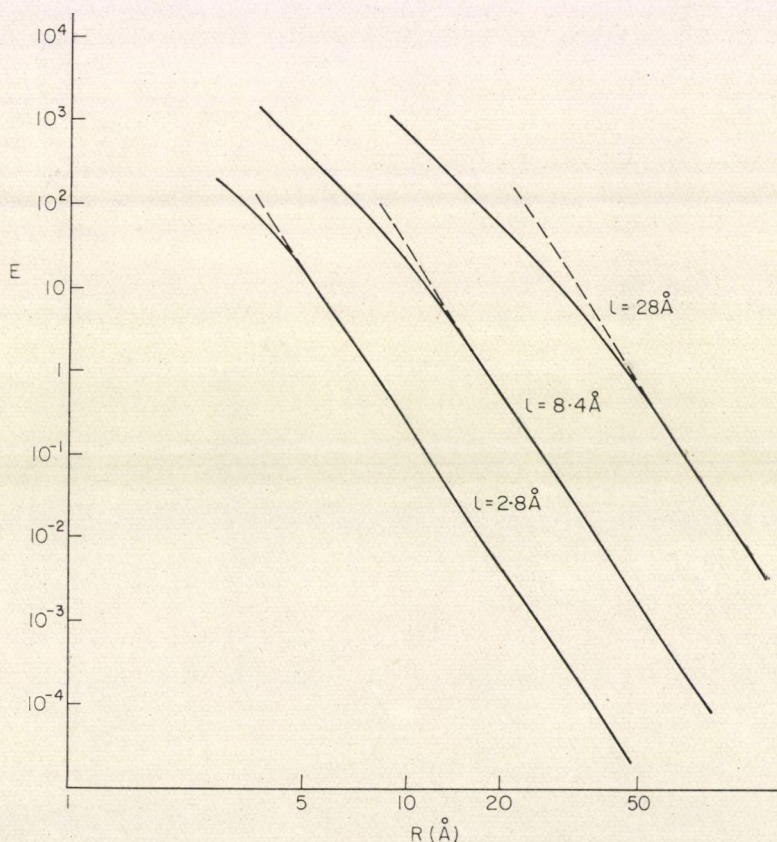
Ha alaposabb ismeretekkel rendelkezni a folyadékok többtest-eloszlásfüggvényére vonatkozóan, akkor direkter módon vizsgálhatnánk a  $V_{ijk}$  háromtest-potenciálok hatását.

A molekulakristályok esetével később külön fogunk foglalkozni. Ionos vagy részben kovalens típusú kristályos szilárd testeket viszont *Lombardi* és *Jansen* [43, 46] már tanulmányozták, és kimutatták, hogy vannak olyan esetek, melyekben a szil-



lárd test alakját ténylegesen ezek a háromtest-erők határozzák meg, amelyek additíve kaphatók a szilárd testben levő, 3 egységből álló rendszerek kölcsönhatásának összegéből.

Ha a diszperziós erőket tekintjük, az additivitás kérdése különösen érdekessé válik. (7)-nek és (14)-nek megfelelően, nagy távolságokra a diszperziós energia  $R^{-6}$ -nal változik, s a koefficiens tagok sorozatának összegével adhatjuk meg. Mármost először is a (7)-től (14)-ig terjedő tárgyalás nem érvényes, ha a kölcsönható egységek olyan nagyok, hogy méretük a köztük levő  $R$  távolsággal összemérhető. Emiatt *Coulson és Davies* [11] tanulmányozott olyan eseteket, melyekben a kölcsönhatásért elsősorban felelős elektronok delokalizált  $\pi$ -elektronok, s az egész molekulára kiterjedő pályákon helyezkednek el. Két olyan benzol-molekula esetében, melyek párhuzamos síkokban helyezkednek el egymással szemközt, az  $R^{-6}$ -törvény eléggé kicsiny távolságokra is majdnem pontosan érvényesnek mutatkozott. Párhuzamos láncok esetén azonban, mint a butadién vagy a hexatrién, ez nem teljesült. A numerikus vizsgálat egyszerűsége kedvéért feltettük, hogy a láncok szigorúan

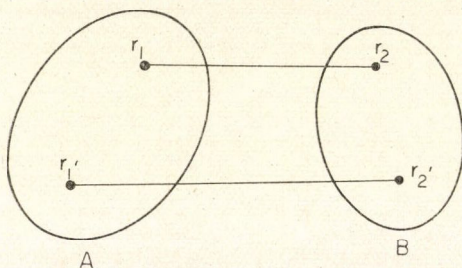


30. ábra. Két hosszú párhuzamos, lineáris,  $\pi$ -elektronokkal rendelkező molekula között fellépő diszperziós energia



lineárisak, és nem lépcsős alakúak (transz-konformáció), mint a valóságban. Minden molekulapályát atomi pályák lineáris kombinációjaként adtunk meg, melyeknek alacsonyabb energiájú fele alapállapotban teljesen betöltött. Csak olyan gerjesztett állapotokat tekintettünk, amelyek a molekulapálya-vegyértékkötések nem betöltött részére való gerjesztésekhez rendelkezhetők. Mivel ezek azok a  $\pi$ -átmenetek, melyekhez a legkisebb  $\Delta E_{an}$ ,  $\Delta E_{bm}$  energia tartozik, várhatjuk, hogy ezek a (7) összeghez hozzájárulást adó legfontosabb átmenetek. Azonkívül a magasabb gerjesztések ilyen elhanyagolása megadja a kölcsönhatási energia alsó határát. Coulson és Davies azt találták, hogy a legtöbb esetben a  $\pi$ -sávhoz tartozó gerjesztések közül a legalacsonyabb játszik meghatározó szerepet az összes többi között. Kiszámították a (8) integrált direkt úton, a (13)–(14)-hez hasonló sorfejtés nélkül. Munkájuknak egy tipikus eredményét mutatja a 30. ábra, amelyen mindkét tengely mentén logaritmikus skálát használtak. Kitűnik, hogy a lánc hosszánál nagyobb távolságok esetén a diszperziós energia jól közelíti az  $R^{-6}$ -törvényt (a numerikus koeficiens is megegyezik a várt értékkel [11]), de olyan távolságokra, melyek kisebbek az egyes molekulák méreteinél, a diszperziós energia csökken. Coulson és Davies vizsgálják az energiában bekövetkező változást oly esetben is, ha az egyik lánc rotációt végez, vagy oldalirányban elmozdul. Ennek a részletezése azonban megtalálható az eredeti cikkben.

Ezekben a számításokban hallgatólagosan feltettük, hogy a  $\pi$ -elektronok szabadon mozoghatnak az egész lánc mentén, s hogy a  $\beta$  rezonancia-integrálok, melyek meghatározzák az egyes molekulapályákhoz tartozó energiákat és koefficiensket, egymással egyenlők. Ez a feltevés azonban valószínűleg nem kifogástalan; ismeretes például, hogy ha úgy módosítjuk a butadién molekulához tartozó rezonancia-integrálokat, hogy megfeleljenek az észlelt kötéstávolságoknak, akkor azt találjuk, hogy a két kettős-kötéses tartomány közötti konjugáció nagymértékben lecsökken. Ennek eredményeképp az elektronok már nem mozognak szabadon az egész molekula fölött, korreláció nélkül. A problémát Longuet—Higgins és Salem [47] vizsgálták, s kimutatták, hogy a diszperziós energiák akkor és csak akkor lokálisan additívak, ha az elektron-korreláció a távolsággal gyorsan csökken. Lényeges lépés az, hogy felhasználjuk a  $V_{00, nm}$ -re vonatkozó (10) mátrix-komponens kifeje-



31. ábra. Jelölések a két molekula között fellépő diszperziós energiához

zést, majd ezt egybevetve a (7) összeg-kifejezéssel az alábbi összefüggést kapjuk (31. ábra):

$$E_{\text{diszp.}} = - \sum_{n,m \neq 0} \sum \frac{1}{\Delta E_{an} + \Delta E_{bm}} \iint \frac{\varrho_{0n}^A(\vec{r}_1) \varrho_{0n}^A(\vec{r}_1') \varrho_{0m}^B(\vec{r}_2) \varrho_{0m}^B(\vec{r}_2')}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| |\vec{r}_1' - \vec{r}_2'|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_1' d\vec{r}_2 d\vec{r}_2' \quad (30)$$

Ilyen módon mindegyik rendszerből két elektron szerepel a kifejezésben. Ezek után rátérünk az Unsöld-közelítésre,  $\Delta E_{an} + \Delta E_{bm}$  helyett egy átlagos gerjesztési energiát használva. Végül a  $\sum_n \varrho_{0n}^A(\vec{r}_1) \varrho_{0n}^A(\vec{r}_1')$  kifejezést az A rendszeren belüli kötésrendek



és töltések segítségével fejezzük ki. Ha az  $A$ -ban és  $B$ -ben meglevő korreláció gyorsan csökken, akkor az összegből csak néhány tag lesz jelentős nagyságú, tehát eredményünk az, hogy fennáll a lokális additivitás. Ha azonban a korreláció lassan csökken, akkor ismeretes, hogy külön az  $A$  vagy a  $B$  távoli atomjai közötti kötésrendek nem csökkennek gyorsan, s így a (30) integrál azt eredményezi, hogy nincs lokális additivitás. A Coulson és Davies [11] által tanulmányozott párhuzamos láncok esetére vonatkozóan Longuet—Higgins és Salem [47] megerősítik, hogy ha a lánc mentén az összes rezonancia-integrál egyenlő, akkor a diszperziós energia a lánc hosszának ötödik hatványával változik; míg ha a rezonancia-integrálok nem egyeznek meg, akkor csupán a második hatvánnyal való változást kapunk eredményül, s ez additivitást jelez. Emiatt tehát a nem-additív diszperziós erők egyedül a fémes vezetők kicsi elemeinek vagy a kondenzált gyűrűs aromás molekuláknak a kölcsönhatása esetén jelentősek.

Ennek a tárgyalásnak a keretében még nem tekintettük a diszperziós háromtest-erőket. Ezek először a  $V$  kölcsönhatási potenciál sorfejtésében lépnek fel, mely a (4) kifejezés megfelelője három kölcsönható rendszerre, ha a perturbációs sorfejtésben a harmadrendű tagokig megyünk el. Ekkor kapunk egy kifejezést, mely — a dipól-közelítésben —  $R^{-9}$ -ed rendű. Pontosabban, mint Axelrod és Teller [48] 1943-ban kimutatták, ez az energia a következő alakú:

$$E(\text{hároms-dipól}) = \frac{\nu(3 \cos \vartheta_A \cos \vartheta_B \cos \vartheta_C + 1)}{R_{AB}^3 R_{BC}^3 R_{CA}^3}, \quad (31)$$

ha a három rendszer —  $A, B, C$  — kicsiny kiterjedésű (pl. atomok), s centrumaik egy  $R_{AB}, R_{BC}, R_{CA}$  oldalú és  $\vartheta_A, \vartheta_B, \vartheta_C$  szögű háromszög csúcspontjaiban vannak. A  $\nu$  koefficiens (részletesebb magyarázat céljából l. [49]-et) integrálformában fejezhető ki:

$$\nu = \frac{3}{\pi} \int_0^\infty \alpha_A(i\omega) \alpha_B(i\omega) \alpha_C(i\omega) d\omega, \quad (32)$$

ahol  $\alpha_A(i\omega), \dots$  stb. az  $A, B, C$  rendszerek — izotrópna feltételezett — dipól-polarizálhatóságai, egy  $i\omega$  képzetes frekvenciánál, éppúgy mint a (20) kifejezésben. Atomi egységekben megadva három H-atom esetén  $\nu=21,64$ , három He-atom esetén pedig  $\nu=1,49$ . Nehezebb atomoknál  $\nu$  gyorsan nő, s három xenon-atomnál már eléri az 5430 értéket. Ezek a háromtest-erők a nemesgázok kristályaiban meglehetősen nagy jelentőségűek, s a teljes kötési energiához 20%-os hozzájárulást is adhatnak, valamint a kristályszerkezetet is befolyásolhatják. Indirekt formában ezek felelősek egy ideális síkfelületen abszorbeált két molekula közötti kölcsönhatás jelentős mértékű csökkenéséért [50], mely utóbbinak létezésére bizonyítékot Everett és Barker talált. Itt a harmadik test szerepét azok az atomok — vagy egyéb egységek — játsszák, melyekből a felület áll. Végül ezek a háromtest-erők, mint kimutatták [51, 52], befolyásolják a szilárd állapotú nemesgázok nullponti energiáját és rugalmas állandóit. A háromtest-erők nyilvánvalóan jelentőséggel bírnak minden olyan helyzetben, amikor a geometriai elrendezés lehetővé teszi, hogy három molekula vagy kölcsönható atom egyidejűleg szorosan egymás mellett legyen.



## 15. Késleltetett diszperziós erők

Röviden meg kell említenünk a késleltetett kölcsönhatásokat, melyek akkor lépnek fel, ha a kölcsönható rendszerek olyan távol vannak egymástól, hogy az az idő, amely egy fényhullámnak szükséges, hogy egyiktől a másikig jusson, összemérhető az  $A$  vagy a  $B$  rendszer egy jellemző belső periódus-idejével. Ha 2 oszcillátor csatolására gondolunk, amikor is közös fázis jön létre, úgy hogy a két momentán dipól egymáshoz képest mindig kedvezően irányított, akkor láthatóan fontos, hogy az elektromágneses tér eljusson egyik oszcillátortól a másikig, mielőtt bármelyik oszcillátor túl nagy mértékben elmozdult volna. Egyébként lehetetlenné válik, hogy kedvező fáziskapcsolat alakuljon ki egyidejűleg  $B$ -re nézve egy  $A$ -ból jövő jelhez képest, és  $A$ -ra nézve egy  $B$ -ből jövő jelhez képest. Ennek eredményeképp a kölcsönhatási energia lecsökken. Ez pontosan az az eredmény, melyet tisztán kvantummechanikai számítás útján kaphatunk; utóbbit először *Casimir* és *Polder* [53] végezte el, majd később sokan mások megismételték és ellenőrizték [54]. Két kis molekula esetén a diszperziós energia már nem  $R^{-6}$ -nal arányos, hanem a következő alakú:

$$F = -\frac{23hc}{8\pi^2 R^7} \alpha_A \alpha_B, \quad (33)$$

ahol  $\alpha_A$ ,  $\alpha_B$  az  $A$ , ill.  $B$  rendszer (izotrópnak tekintett) sztatikus polarizálhatósága. Némi elégedettségre adhat okot, hogy ha megfelelő elővigyázatossággal járunk el, akkor két igen közeli szilárd test között kísérletileg észlelt vonzóerő kiválóan egyezik [55, 56] azzal az értékkel, amelyet a (33)-hoz hasonló tagok közvetlen összegzése alapján várhatunk. Ezek azonban meglehetősen speciális erőtipusok, s ezért nem vizsgáljuk őket tovább, hanem figyelmünket a tanulmány utolsó fő területére, a molekulakristályokba való tömörülésért felelős erőhatásokra fordítjuk.

## 16. Molekulakristályok

A molekulakristályok szerkezetét befolyásoló erőket könnyen felsorolhatjuk. A tisztán belső erők ebből a szempontból nem jelentősek, bár természetesen teljes mértékben ezek felelősek az egyes molekulák alakjáért és méreteiért. A kristályszerkezet szempontjából tekintetbe kell vennünk

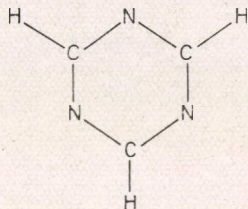
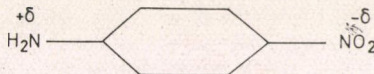
- a) az elektrosztatikus erőket, melyek az egyes különálló egységekben levő töltések, dipólok, kvadrupólok stb. kölcsönhatásából származnak (3. §);
- b) a diszperziós erőket, melyekbe beleérthetjük, ha szükséges, mind a diszperziós háromtest-erőket, mind a megszokott kéttest-erőket (5. és 14. §);
- c) a töltésfelhők átfedéséből származó taszító erőket (4. és 6. §), megint csak beleértve a háromtest-erőket is, ha a körülmények úgy kívánják.

Egyéb erőhatások, melyek pl. a belső mozgásból, vagy az intermolekuláris mozgásból, vagy entrópia-effektusokból származnak, kisebb jelentőségűek, bár egy végleges számításnak ezek mindegyikét tartalmaznia kellene [57].

Először az elektrosztatikus erőket tárgyaljuk. Ezek többnyire meglepően kicsinyek a legtöbb molekulakristályban. Így pl. *R. Mason* és *I. McRae* egy újabb keletű munkájukban kimutatták, hogy az *s*-triazin (32. ábra) kristályaiban, ahol a gyűrűben fennálló töltéeloszlás a C és N atomokhoz tartozó váltakozó  $\pm q$  töltésekkel reprezentálható, a teljes elektrosztatikus kölcsönhatások mindössze



$2,14 q^2$  kcal/mólt tesznek ki. Mivel  $q$  valószínűleg nem haladja meg a 0,2 elektron-egységet, ez azt sugallja, hogy ezek az erők rendszerint nem dominánsak. De olyan esetekben, amikor a különböző lehetséges kristályszerkezetek energiakülönbsége kicsiny, akkor már kicsiny hozzájárulások is jelentősek lehetnek. Lehet, hogy ilyen erők felelősek a BN rácssíkoknak a grafit rácssíkjaitól eltérő tömörüléséért: a BN-ben az egyik síkban levő B-atomok a lehető legszorosabban helyezkednek el a szomszédos

32. ábra. Az *s*-triazin molekula

33. ábra. A nitroanilin

szédos síkokban levő N-atomokhoz képest, míg a grafitban nincsenek ilyen elektrosztatikus erők, melyek kedveznének az ilyenfajta szoros illeszkedésnek. Valószínűleg a nitroanilinhez (33. ábra) hasonló molekuláknak a kristályban való elhelyezkedését is erősen befolyásolja az a tény, hogy előnyösebb, ha az egyik molekula pozitív töltésű amino-csoportja a szomszédos molekulák negatív töltésű nitro-csoportjai mellé kerül.

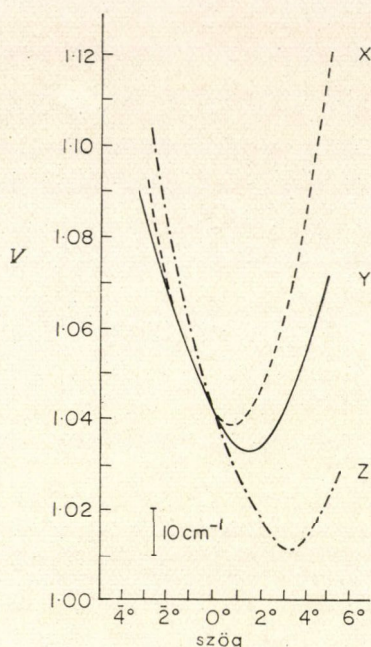
Ezeket az erőket lényegében dipól-dipól-erőknek tekinthetnénk. Vannak azonban még kvadrupól-kvadrupól erők is, és elképzelhető, hogy ezek jelentősek lehetnek, ha a dipól-dipól-erők zérussal egyenlők. *Craig* és társai [58] ezeket benzol és naftalin molekulák esetében tanulmányozták, melyeknek természetesen nincs dipólmomentumuk. Azt az érdekes következtetést vonták le, hogy ezek az erők a diszperziós energiának csak mintegy 5%-át adják, továbbá hogy ezek jóformán semmiféle hatással nincsenek a kölcsönös orientációra. Általában tehát az elektrosztatikus erőket elhanyagolhatjuk, kivéve, amíg az eredő szublimációs hőhöz hozzájárulást adnak.

A diszperziós erők sokkal fontosabbak, bár, a nemesgázok kristályaihoz hasonló sok kis rendszer esetének kivételével, csupán a kétest-hozzájárulásokat szükséges számításba vennünk. *Craig* és társai [58] a benzol esetében tanulmányozták a teljes diszperziós energiának mind a hőmérséklettől, mind az orientációtól való függését. A hőmérsékleti hatások függnek a molekulák közti  $R$  távolságtól, így tehát a diszperziós energia, amely  $R^{-6}$  szerint változik, erősen függ  $T$ -től. Ha a hőmérséklet  $-3^\circ\text{C}$ -ról  $-135^\circ\text{C}$ -ra süllyed, akkor a diszperziós energiában mintegy 15%-os változás mutatkozik; viszont ez az energia minden esetben csaknem teljesen független a szögétől. Így, bár a szublimációs energia nagyobb része a diszperziós erőktől származik, utóbbiak nem játszanak fontos szerepet a molekuláknak az egységcellában elfoglalt orientációjának rögzítésében. Hasonló eredményt kaptak a naftalin esetében is [59].

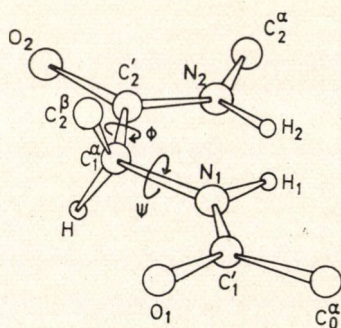
Hátra van még a taszító erők tárgyalása. Számszerűen ezek rendszerint jelentősen kisebbek a diszperziós erőknél. Jelentőségük abból — a 10. ábrán extrém formában szemléltetett — tényből származik, hogy meredeken kezdődnek, s így meg lehetőségen jól definiált van der Waals-rádiust eredményeznek. Végeredményben



azt mondhatjuk, hogy a molekulák elrendeződése olyan, hogy a molekulák a lehető legszorosabban tömörüljenek, azonban a legkisebb megközelítési távolságok ne legyenek sokkal kisebbek a megfelelő van der Waals-rádiuszok összegénél. Hogy ezek a taszító erők milyen élesen befolyásolják a molekulák orientációját, azt jól szemlélteti a 34. ábra, melyet az [58]-ból vettünk át, s amely a teljes  $H...H$  taszítási energia ( $V = \sum B e^{-CR}$ , l. a (26) egyenletet) változását ábrázolja a molekuláknak az egymásra merőleges  $x, y, z$  tengelyek körüli azonos fázisú rotációjának függvényében. Világosan látható, hogy ezek a potenciális energiák éles minimummal rendelkeznek. E taszító erők nyilvánvalóan befolyásolják a molekulák tömörülését.



34. ábra. A benzol teljes  $H...H$  taszítási energiája, a molekulák  $x, y$  és  $z$  tengely körüli szimmetrikusan csatolt rotációjának függvényében



35. ábra. Jelölések a polipeptid láncokban fellépő belső rotációkhoz

Ezt a tényt igen tanulságos módon lehet szemléltetni. Létezik egy,  $B_{9g}$  cellaszimmetriához tartozó librációs módus, melynél a szomszédos benzol molekulapárok síkból kifelé irányuló tengelyeik körül rotációt végeznek, de mozgásuk két illeszkedő fogaskerék módjára kapcsolt egymáshoz. Ennek a librációnak az erőállandója igen alacsony, nagyságrendje az ugyanazon tengelyek körüli másik két rotáció erőállandójának mindössze egyhuszad része. Ez azt mutatja, mennyire fontosak a  $H...H$  taszító kölcsönhatások nemcsak a kristályszerkezet rögzítésében, hanem a vibráció és rotáció normál módusainak meghatározásában is.

Mint dr. Judith Milledge indítványozta, teljes mértékben lehetséges a benzol vagy naftalin molekulakristályokban létrejövő orientációk meghatározása oly módon, hogy a molekulacentrumok helyzetét rögzítjük, majd e centrumok körüli orientációkat úgy választjuk meg, hogy egy  $\sum 1/r_{HH}^2$  típusú kifejezés minimális legyen egy-egy centrális molekula és annak összes közvetlen szomszédjai közötti kölcsönhatásokra vonatkozóan.

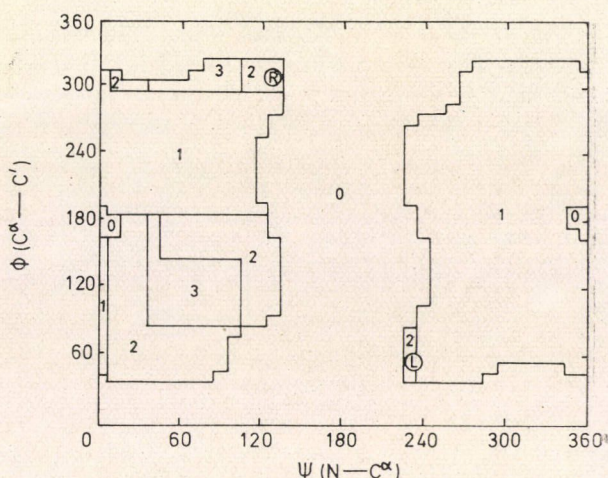
Egy másik, bár nagyon eltérő típusú példát találunk Sheraga és társai [60] munkájában, akik polipeptid láncok lehetséges konfigurációit tanulmányozták. Egy polipeptid-lánc egy darabját a  $C_1C_2$ , ill.  $C_1N_1$  kötések körüli  $\Phi$ , ill.  $\psi$  forgásszögek értékei adják meg. A [32]-ben leírtakhoz hasonló kölcsönhatási potenciálokat használva, a konfigurációkat néhány fok pontossággal megtudták jósolni. Ha azonban kemény-gömb modellel (rögzített van der Waals-rádiusz) dolgozunk, akkor még figyelemre méltóbb eredmények kaphatók. Ennek alapján térbeli ábra rajzolható meg, amelyet a 36. ábrán láthatunk; ez azokkal a területekkel kapcsolatos megengedett konformációkat



adja meg, melyekben a ( $\psi$ ,  $\Phi$ ) pont található. A 36. ábrán mutatott példa a glicin— $L$ — $X$  dipeptid rendszerhez tartozik, ahol  $X$  lehet glicin, alanin vagy valin. Az  $R$ -rel, ill.  $L$ -lel jelölt pontok azokat a szögeket jelölik, amelyek a jobbra, ill. balra csavarodó  $\alpha$ -spirálok ismétlődő egységeiben találhatók. Az ilyenfajta diagramok igen értékesek, ha ki akarjuk mutatni, hogy a különböző típusú spirálok mely formái alakulhatnak ki, és a jövőben valószínűleg nagy szerepet fognak játszani az összes proteinfajták tulajdonságainak megértésében.

Mindezen nyilvánvaló sikerek mellett elég sajnálatos tény, hogy még olyan

egyszerű molekuláknál, mint a benzol, sem nyertek eddig jó egyezést a diszperziós és taszító erők abszolút értékeire vonatkozóan. Például Salem és Banerjee [61] a diszperziós energiát  $-10,3$  kcal/mól-nak, a taszítási energiát pedig  $+1,5$  kcal/mól-nak számították, amely  $8,8$  kcal/mól-os számított szublimációs energiát eredményez; Rae és Mason [62] viszont rendre a  $-20,5$  és  $+7,8$  kcal/mól értékeket kapták, melyekhez tartozó számított szublimációs energia  $12,7$  kcal/mól. Ez néhány szempontból nem kielégítő. Valószínűnek látszik azonban, hogy ez csak átmeneti állapot, ami annak a ténynek tulajdonítható, hogy az ilyen jellegű számítások még gyermekcipőben járnak. Ha több tapasztalatot szerzünk a molekulák szélesebb skálájára vonatkozólag, akkor majd jobb egyezést várhatunk.



36. ábra. Glicin— $L$ — $X$  dipeptid belső-rotáció-szögeinek értéktartományait bemutató ábra. Az 1., 2. és 3. tartományok  $X$ =glicin esetén megengedettek, a 2. és 3.  $X$ =alanin esetén, a 3. terület pedig  $X$ =valin esetén. A 0. tartományban semmilyen konformáció sem megengedett

## 17. Befejezés

A nem-valencia-erőknek még sok egyéb vonatkozása van, amelyekre nem térünk ki ebben az áttekintésben. Az egyik ilyen szempont a folyadékok szerkezete, ahol a háromtest-erők bizonyára jelentősek; egy másik: az az információ-típus, amely — különösen folyadékokban — a mag-mágneses rezonancia árnyékolási állandók gondos tanulmányozása útján nyerhető. Megint másik a hidrogén-kötések témája, ahol is az erők részben elektrosztatikus, részben valencia-jellegűek. Nem számoltunk be továbbá annak a széles körű munkának nagy részéről, amelyet jelenleg végeznek molekuláris szórási eljárásokkal, melyek kapcsán a potenciális energia-görbe belső részét lehet tanulmányozni, a görbe taszító szakaszán. E munkának legnagyobb része, valamint az újabban végzett, meglehetősen kifinomított elméleti számítások, csupán kicsiny rendszerekre — rendszerint csak atomokra — vonatkoznak. Így azok ennek az áttekintésnek a hatáskörén kívül esnek [63]. Ahhoz



azonban elegendő anyagot szolgáltatunk, hogy igazoljuk azt az állítást, miszerint ezek az erők az ismertebb, kémiai kapcsolatokban szerepet játszó erőkkel összemérhető jelentőségűek, és széleskörűen alkalmazhatók. A kvantumkémia jelenleg olyan korszak felé tart, melyben a stacionárius állapotok tanulmányozásától a nem-stacionárius — más néven idő-függő — állapotok tanulmányozása felé haladunk; a szerkezet tárgyalásától a reakciókészség tárgyalása irányában. Az e területen való előrehaladás megkívánja, hogy a nem-valencia erőkről jó alapvető ismeretekkel rendelkezünk.

Fordította: *Molnár Livia*

### IRODALOMJEGYZÉK

1. A részletek megtalálhatók *J. O. Hirschfelder* és *W. J. Meath* ismertető cikkében: *Advances in Chemical Physics*. Interscience, 12. köt., 1—106. o., 1967.
2. *L. Salem*, *Proc. Roy. Soc. (London)* A 264, 379, 1961.
3. *W. E. Bleick* és *J. E. Mayer*, *J. Chem. Phys.* 2, 252, 1934.
4. *P. E. Phillips*, *Phys. Rev.* 125, 1981, 1962. E számításokat újabban megerősítette és tökéletesítette: *G. M. Matsumoto*, *C. F. Bender* és *E. R. Davidson*, *J. Chem. Phys.* 46, 402, 1967.
5. *J. E. Jordan* és *I. Amdur*, *J. Chem. Phys.* 46, 165, 1967.
6. *V. Magnasco* és *G. F. Musso*, *J. Chem. Phys.* 46, 4015, 1967; 47, 1723, 1967.
7. *F. London*, *Z. Phys. Chem. B* 11, 222, 1930.
8. *H. C. Longuet-Higgins*, *Discussions of Faraday Soc.* 40, 7, 1965.
9. *F. London*, *Trans. Faraday Soc.* 33, 8, 1937.
10. *F. London*, *J. Physikal. Chem.* 46, 305, 1942.
11. *C. A. Coulson* és *P. L. Davies*, *Trans. Faraday Soc.* 48, 777, 1952.
12. *R. Pariser* és *R. G. Parr*, *J. Chem. Phys.* 21, 466, 1953.
13. *Y. M. Chan* és *A. Dalgarno*, *Molec. Phys.* 9, 349, 1965.
14. *W. D. Davidson*, *Proc. Phys. Soc. (London)* 87, 133, 1966.
15. *L. [1]*, 164. o.
16. *Unsöld*, *Z. Physik* 43, 563, 1927.
17. *A. D. McLachlan*, *Proc. Roy. Soc. A* 271, 387, 1963.
18. Igen részletes beszámoló található pl. *J. O. Hirschfelder*, *C. F. Curtiss* és *R. B. Bird*: *Molecular Theory of Gases and Liquids* c. könyvében, Wiley, New York, 1964.
19. *T. Kihara*, *Rev. Mod. Phys.* 25, 831, 1953; *Progress Theor. Phys. Supplement* No. 40, 177. o., 1967.
20. *C. A. Coulson* és *S. Senent*, *J. Chem. Soc. (London)*, 1955, 1819. o.
21. *C. A. Coulson* és *S. Senent*, *J. Chem. Soc. (London)*, 1955, 1813. o.
22. A vegyes tagokat elvileg tekintetbe kellene venni; azonban, mint *Coulson* és *Golebiewski* rámutattak [*J. Chem. Soc. (London)*, 1960, 4948. o.], sem ezek, sem egyéb lehetséges tagok nem vezetnek lényeges eltéréshez a végeredményben.
23. *A. D. McIntosh*, *J. M. Robertson* és *V. Vand*, *J. Chem. Soc. (London)* 1954, p. 1819.
24. *L. C. A. Coulson*, *Valence*, Oxford Univ. Press, 1951.
25. *H. Eyring*, *J. Amer. Chem. Soc.* 54, 3191, 1932.
26. *F. J. Adrian*, *J. Chem. Phys.* 28, 608, 1958.
27. *C. A. Coulson* és *D. Stocker*, *Molec. Phys.* 2, 397, 1959.
28. *D. E. Williams*, *J. Chem. Phys.* 45, 3770, 1966; 47, 4680, 1967.
29. *C. A. Coulson* és *C. W. Haigh*, *Tetrahedron*, 19, 527, 1963.
30. *J. B. Hendrickson*, *J. Amer. Chem. Soc.* 83, 4537, 1961.
31. *J. Westheimer* és *J. B. Hendrickson*, *J. Amer. Chem. Soc.* 89, 4345, 1967.
32. *A. Abe*, *R. L. Jernigan* és *P. J. Flory*, *J. Amer. Chem. Soc.* 88, 631, 1966.
33. *C. A. Coulson*, „Int. Conference on Quantum-mechanical methods in Valence Theory” (Shelter Island, Long Island, New York 1951), Office of Naval Research, 42. o.
34. *A. Almennigen* és *O. Bastiansen*; munkájukat ismertető cikkben *O. Bastiansen* és *P. N. Skancke* írják le, *Advances in Chemical Physics*, Interscience Publishers, 3. köt.
35. *G. Dallinga*, *P. J. Smit* és *E. L. Mackor*, „Steric Effects in Conjugated Systems”, G. W. Gray, London, Butterworth 1958, 150. o.



36. *M. Levy, M. S. Newman és M. Szwarc*, *J. Amer. Chem. Soc.* **77**, 4225, 1955.
37. *C. A. Coulson*, "The dependence of electronic energy levels upon deformation in aromatic hydrocarbons" c. cikk, 1. [37], 8. o.
38. *C. A. Coulson*, *J. Chem. Soc. (London)* 1955, 1431. o.
39. *Oxford D.* Phil. thesis 1957, nem közölt mű.
40. *A. Shortak*, *J. Chem. Phys.* **23**, 1809, 1955.
41. *Miss D. Makin* jelenleg dolgozik ennek és más ehhez hasonló számításoknak a befejezésén.
42. *L. Jansen és E. Lombardi*, *Chem. Phys. Letters* **1**, 417, 1967.
43. *L. Jansen*, *Phys. Rev.* **125**, 1798, 1962; **135**, A1292, 1964.
44. *J. S. Rowlinson*, *Discussions of Faraday Soc.*, **40**, 53, 1965.
45. *O. Sinanoglu*, *Chem. Phys. Letters* **1**, 340, 1967; továbbá *Advances in Chemical Physics*, **12**, Interscience, 1967, 6. fejezet.
46. *E. Lombardi és L. Jansen*, *Phys. Rev.* **136**, A 1011, 1964; **140**, A 275, 1965; **151**, 694, 1966.
47. *H. C. Longuet-Higgins és L. Salem*, *Proc. Roy. Soc. A* **259**, 433, 1961.
48. *B. M. Axelrod és E. Teller*, *J. Chem. Phys.* **11**, 299, 1943.
49. *A. Dalgarno*, *Adv. in Chemical Physics*, Interscience, **12**. köt., 142. o., (87) egyenlet.
50. *A. D. McLachlan*, *Disc. of the Faraday Soc.* **40**, 239, 1965.
51. *C. G. Chell és I. J. Zucker*, *J. Phys. C* **1**, 35, 1968.
52. *C. G. Chell*, *J. Phys. C* **1**, 266, 1968.
53. *H. B. G. Casimir és D. Polder*, *Phys. Rev.* **73**, 360, 1948.
54. *L. E. A. Power* ismertető cikkét, [49], 167. o.
55. *B. V. Derjaguin, I. I. Abrikosova és E. M. Lifchitz*, *Quart. Rev.* **10**, 295, 1956.
56. *M. J. Sparnaay*, *Physica*, **25**, 217, 1959.
57. *A. I. Kitaigorodskij*, *Acta Cryst.* **21**, Abstract G. 4 of papers read at the 7th International Congress, Moszkva 1966, Supplement Dec. 1966.
58. *D. P. Craig, P. A. Dobosh, R. Mason és D. P. Santry*, *Disc. of the Faraday Soc.* **40**, 110, 1965.
59. *D. P. Craig, R. Mason, D. P. Santry és P. Pauling*, *Proc. Roy. Soc. A* **286**, 98, 1965.
60. Ld. pl. *H. A. Sheraga, S. J. Leach, R. A. Scott és G. Némethy*, *Discussions of the Faraday Soc.* **40**, 268, 1965, és egyéb ott megjelölt cikkeket, különösen *R. A. Scott és H. A. Sheraga*, *J. Chem. Phys.* **42**, 2209, 1965.
61. *L. Salem és K. K. Banerjee*, *Molec. Phys.* **11**, 405, 1966.
62. *A. I. M. Rae és R. Mason*, *Proc. Phys. Soc. A* **304**, 487, 1968.
63. A jelenlegi helyzetről részletes beszámolót ad [1].



# FOLYÓIRAT ISMERTETÉS

## Thin Solid Films

(Elsevier Publishing Company, Amsterdam, London, New York)

## Thin Films

(Gordon and Breach Science Publishers, New York, London, Paris)

Mindkét folyóirat tárgyköre-célkitűzése — a szerkesztő bizottságok megfogalmazásában is — csaknem azonos. Helyet, közös fórumot kívánnak biztosítani a vékonyrétegfizika elméleti és kísérleti eredményeinek közlésére, s az alkalmazás körében szerzett olyan tapasztalatoknak közzétételére, amelyek az alapjelenségek megértését elősegítik, ismereteinket újabb adatokkal egészítik ki.

Úgy érzem, a csaknem egyidejű megjelenésük nem véletlen, de a szükségszerűséget s az igényt tükrözi. (A Thin Solid Films 1967 júniusában indult, a Thin Films első száma pedig 1968 januárjában jelent meg.) A vékonyrétegek fizikája ugyanis az utóbbi 10 évben a fizika új ágává nőtte ki magát. Bár művelésének kezdetét a múlt század végének fizikája tekintheti magáénak, reneszánszát napjainkban éli, s ezt egyrészt a rétegeket egyre szélesebb körben alkalmazó ipar igényei, másrészt az elektronoptikai és vákuumtechnikai ipar fejlődése — a hatékony mérőberendezések gyártása — váltotta ki. Ezzel együtt ugrásszerűen nőtt azoknak a mérnököknek, fizikusoknak a száma, akik e tudományterületen dolgoznak. Szétszórtan, a legkülönbözőbb szakterületek folyóirataiban láttak napvilágot — a tudományterület interdiszciplináris jellegének következményeként — az általános érdeklődésre számot tartó dolgozatok, s egyre nagyobb számban is, megnehezítve a legújabb eredmények áttekintését. E közös gondból eredeztethetjük mind a folyóiratok indításának kezdeményezését, mind pedig azt az érdeklődést, amely e folyóiratok megjelenését kísérte.

Mindkét folyóirat szerkesztő bizottsága széles körű, a tudományterület világviszonylatban jelentős művelői vesznek abban részt.

A Thin Solid Films kezdetben kéthavonként, 1969 januárjától pedig havonként jelenik meg. Füzeteit évenként két kötetbe sorolja. A dolgozatok megjelenéséhez szükséges idő 2—3 hónap, míg a rövid közleményeket a beküldés után következő számban hozzák. A füzetek — az eddigi tapasztalat szerint — szabályosan jelennek meg, s hozzánk is időben megérkeznek. A jelek arra mutatnak, hogy a folyóiratot széles körben ismerik és figyelik.

A Thin Films első száma 1968 januárjában látott napvilágot. Azóta összesen 3 füzete jelent meg, ennyiről van tudomásunk. Kettő 1968-ban és egy 1969-ben.

Mindkét folyóirat angol, francia és német nyelven közöl dolgozatokat. Megjelentetnek könyvismertetéseket, s tájékoztatást adnak konferenciákról is.

A folyóiratok vonzása már érezhető, eddig is számos alapvető dolgozatot közöltek. A hagyományok természetes kialakulása, s egyre szélesebb körben való elterjedésük nyilvánvalóan fokozza majd ezt. Jelenleg a két folyóirat soknak tűnik, nem mintha a tudományterület közleményeinek száma volna kevés (évente ezernél több), hanem tradíciójuk hiánya miatt.

A Thin Solid Films szerkesztő bizottságának Pócza Jenő személyében magyar tagja is van.

Barna B. Péter



# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## LINEÁRIS TRANSZFORMÁCIÓK CSOPORTJAINAK ÉS ÁBRÁZOLÁSAIKNAK ANALITIKUS TULAJDONSÁGAIRÓL\*

NEUMANN JÁNOS

### Bevezetés

#### 1. §

Ennek a munkának a tárgya azon folytonossági, differenciálhatósági és analiticitási feltevések szerepének tisztázása, amelyek a lineáris transzformációk (folytonos) csoportjainak és ábrázolásaiknak elméletében döntő szerepet játszanak. Fejtegetéseink folyamán ki fog tűnni, hogy a lineáris transzformáció-csoportok esetében uralkodó viszonyok a legtöbb vonatkozásban igen kedvezőek.

Sikerülni fog ugyanis minden ilyen csoportot (korlátozás nélkül) olyan alakra hozni, amely a folytonos csoportok elméletében egyedül képezi vizsgálat tárgyát; valamely lineáris transzformáció-csoportnak mindenkor van olyan invariáns alcsoportja, amely véges számú paraméter segítségével analitikusan s kicsinyben egyértelműen előállítható, és amelynek faktorcsoporthoz diszkrét. (Természetesen ezeket a fogalmakat még közelebbről precizíroznunk kell és ezt meg is fogjuk tenni.)

Továbbá minden lineáris csoporthoz kifogástalan módon hozzárendelhető egy „infinitezimális csoport”; kitűnik, hogy a csoport és az infinitezimális csoport kölcsönös kapcsolatának jellege igen egyszerű.

Ezzel szemben azt találjuk, hogy nem minden „infinitezimális csoport”-hoz rendelhető csoport a szó szokásos értelmében; ez utóbbi körülménnyel a függelékben kívánunk foglalkozni.

Az ábrázolásokra vonatkozóan a következő eredményt nyerjük: valamely lineáris csoport minden ábrázolása, melynek ingadozása az egység környezetében  $< 1$  (a lineáris transzformációk terében értelmezett „távolság” alkalmas definíciója mellett), mindvégig folytonos, akárhányszor differenciálható, sőt bármely csoport-elem környezetében hatványsor segítségével előállítható. (Ezekben a hatványsorokban azonban — komplex csoportok esetében — a transzformációs együtthatók valós és képzetes része külön lép fel, úgyhogy innen az analiticitás nem következik a megszokott értelemben. Általában az ábrázolás nem is analitikus.<sup>1)</sup>)

Minden ilyen ábrázolás esetében létezik továbbá az ún. „infinitezimális ábrázolás” a megszokott tulajdonságokkal.

Az a premissza, hogy az ingadozás az egység környezetében  $< 1$ , nem élesíthető lényegesen tovább; léteznek ugyanis, amint majd látni fogjuk, diszkontinuus ábrázolások, melyek esetében ez az ingadozás  $= 2$ . (Ezek az ábrázolások egyébként sehol sem folytonosak.) Így legfeljebb a konstans javításáról lehet szó.

\* Math. Z. 30, 3 (1927).

<sup>1</sup> Pl. az összes zérustól különböző determinánsú (komplex) síkbeli lineáris transzformáció csoportjának a determináns abszolútértéke nemanalitikus ábrázolását képezi.



## 2. §

Ezen — a valós függvénytan „patológikus” lehetőségein mérve — meglehetősen kedvező eredményeknek a benső oka mindenesetre a súlyos következményekkel járó csoporttulajdonság: a csoport két transzformációjával együtt tartalmazza szorzatukat is, és az ábrázolásokra vonatkozóan analóg ezzel a függvényegyenlet szerepe, amelynek azok eleget tenni tartoznak: ha ugyanis a  $D$  ábrázolást mint az  $A$  lineáris transzformációk függvényét fogjuk fel, fennáll:

$$D(A \cdot B) = D(A) \cdot D(B).$$

Azt, hogy az ilyen függvényegyenleteknek éppen az 1. §-ban vázolt hatásuk van: a teljesen reguláris megoldásokon kívül csak mindenütt diszkontinuus megoldásokat engednek meg, lehetőleg egyszerű példán kívánjuk megvilágítani.

Tekintsük az

$$f(xy) = f(x)f(y)$$

függvényegyenletet ( $x, y$  pozitív számok). Azon egydimenziós transzformáció-csoportnak, amely az egyenes valamennyi, pozitív szám meghatározta dilatációját foglalja magában, az összes egydimenziós ábrázolását ez a függvényegyenlet definiálja.

A

$$\varphi(\xi) = \ln(f(e^\xi))$$

transzformáció függvényegyenletünket a

$$\varphi(\xi + \eta) = \varphi(\xi) + \varphi(\eta)$$

„lineáris függvényegyenletbe” transzformálja. Erről pedig Hamel tudvalevőleg megmutatta,<sup>2</sup> hogy a teljesen reguláris megoldásokon kívül ( $\varphi(\xi) = a\xi$ ) csak mindenütt diszkontinuus megoldásai vannak, és hogy mind a két eset előfordul.

Egyébként az exponenciális függvény és a logaritmus fejtegetéseinkben épp oly alapvető szerepet játszik, mint az

$$f(xy) = f(x)f(y)$$

függvényegyenlet fent vázolt tárgyalásában. Ezeket a függvényeket mátrixokra kiterjesztett alakjukban fel kell majd használnunk; különösen a csoport és az infinitezimális csoport, valamint az ábrázolás és az infinitezimális ábrázolás viszonyával kapcsolatosan játszanak teljes mértékben uralkodó szerepet.

## 3. §

Eredményeink sok ellenvetést elhárítanak, melyek a valós függvénytan szigorú álláspontjáról a lineáris transzformációk csoportjait és azok ábrázolásait illető, az infinitezimális csoport szemügyrevételén alapuló vizsgálatokkal szemben felhozhatók. Mindenesetre az a körülmény, hogy nem minden „infinitezimális csoport” származtatható valamely csoportból (vö. a Függeléssel), bizonyos fokú elővigyázatra int az ilyenfajta megfontolásoknál.

<sup>2</sup> Hamel, Math. Annalen 60, 459. old.



Elsősorban Weylnek a félig egyszerű csoportok ábrázolásaira vonatkozó eredményei<sup>3</sup> válnak ezáltal mentessé a messzemenő differenciálhatósági feltevésektől. Eredményeink erre vonatkozó részét egyébként már egy másik munkában kifejtettük.<sup>4</sup>

## I. Az exp és a ln függvény

### 1. §

A lineáris transzformációkat  $m$  dimenzióban ( $m=1, 2, \dots$ ; ez legyen most rögzített szám) a transzformációs mátrix — egy  $m$ -dimenziós, négyzetes (esetleg komplex elemekkel rendelkező) mátrix — megadásával jellemezzük. A mátrixot  $2m^2$  valós szám rögzíti: az  $m^2$  elem valós és képzetes része. Ezeket tekinthetjük a  $2m^2$ -dimenziós (valós)  $\Re_m$  euklideszi tér egy pontja Descartes-koordinátáinak; ezáltal a lineáris transzformációk vagy mátrixok egy-egyértelmű megfeleltetésbe kerülnek  $\Re_m$ -mel. Mindkét terminológiát fogjuk a következőkben használni s a transzformációkra egyaránt fogunk mint mátrixokra és mint  $\Re_m$  pontjaira hivatkozni.

Ha  $A$  és  $B$  két mátrix, úgy

$$A \pm B, AB, \alpha A \quad (\alpha \text{ komplex szám})$$

jelentése a szokott,  $O$  és  $E$  a null-, ill. az egységmátrix. Az  $A$  mátrix determinánsát  $\det A$ -val jelöljük.

### 2. §

Az  $|A|$  jel  $A$  és  $O$  (közönséges euklideszi) távolságát jelenti; ha tehát  $A$  elemei:  $a_{\mu\nu}$  ( $\mu, \nu=1, 2, \dots, m$ ), úgy<sup>5</sup>

$$|A| = \sqrt{\sum_{\mu, \nu=1}^m |a_{\mu\nu}|^2};$$

$|A|$  neve:  $A$  abszolútértéke.

A

$$|O| \equiv 0, \quad |E| = \sqrt{m}, \quad |\alpha A| = |\alpha| |A| \quad (\alpha \text{ komplex szám})$$

relációk nyilvánvalóak;

$$|A \pm B| \leq |A| + |B|, \quad |A \pm B| \geq |A| - |B|$$

nem más, mint a „háromszög-egyenlőtlenség” az euklideszi térben. Még megmutatjuk, hogy<sup>6</sup>

$$|AB| \leq |A| |B|.$$

<sup>3</sup> Weyl, Math Zeitschr. **23** (1925), 271. old.; **24**, 328. és 377. old.

<sup>4</sup> Neumann, Sitzungsber. d. Preuss. Akad., 1927. március 17-i ülés.

<sup>5</sup> Ezt a fogalmat először Frobenius használta.

<sup>6</sup> Ennek az összefüggésnek az első bizonyítása Wedderburnnél található.



Ezt a következőképpen láthatjuk be ( $A$  és  $B$  elemeit  $a_{\mu\nu}$ , ill.  $b_{\mu\nu}$  jelöli):

$$\begin{aligned} |AB|^2 &= \sum_{\mu, \nu=1}^m \left| \sum_{\pi=1}^m a_{\mu\pi} b_{\pi\nu} \right|^2 \leq \sum_{\mu, \nu=1}^m \left( \sum_{\pi=1}^m |a_{\mu\pi}| |b_{\pi\nu}| \right)^2 \\ &= \sum_{\mu, \nu, \pi=1}^m |a_{\mu\pi}|^2 |b_{\pi\nu}|^2 + 2 \sum_{\substack{\mu, \nu, \varrho, \sigma=1 \\ \varrho < \sigma}}^m |a_{\mu\varrho}| |b_{\varrho\nu}| |a_{\mu\sigma}| |b_{\sigma\nu}| \\ &\leq \sum_{\mu, \nu, \pi=1}^m |a_{\mu\pi}|^2 |b_{\pi\nu}|^2 + \sum_{\substack{\mu, \nu, \varrho, \sigma=1 \\ \varrho < \sigma}}^m (|a_{\mu\varrho}|^2 |b_{\sigma\nu}|^2 + |a_{\mu\sigma}|^2 |b_{\varrho\nu}|^2) \\ &= \sum_{\mu, \nu, \varrho, \sigma=1}^m |a_{\mu\varrho}|^2 |b_{\sigma\nu}|^2 = \sum_{\mu, \varrho=1}^m |a_{\mu\varrho}|^2 \sum_{\nu, \sigma=1}^m |b_{\sigma\nu}|^2 = |A|^2 |B|^2, \end{aligned}$$

azaz  $|AB| \leq |A| |B|$ , amint állítottuk.

(Ügyeljünk arra, hogy  $|E|$  nem egyenlő eggyel!)

Az abszolútérték bevezetésével az összes lineáris transzformáció halmazát ( $m$  dimenzióban) felruháztuk az euklideszi tér metrikájával és topológiájával; minden további nélkül világos immár, mit kell zárt, nyílt, korlátos, összefüggő halmazokon, valamint folytonos, differenciálható és analitikus függvényeken értenünk.<sup>7</sup> (A folytonos csoportok elméletében a „zárt csoport” fogalma nagy szerepet játszik; ezt a mi terminológiánkban alkalmasint jobban ki lehetne fejezni a „korlátosan zárt” vagy a „kompakt” megjelöléssel.)

### 3. §

Végtelen mátrix-sorozatok vagy -sorok (összegek) konvergenciája valamely meghatározott mátrixhoz az általunk bevezetett abszolútérték értelmében (azaz: a különbség abszolútértékének zérushoz tartása) nyilvánvalóan ugyanazt jelenti, mint az elemenkénti konvergencia. Így tehát valamennyi ismert konvergencia-kritérium alkalmazható a mátrixokra.

Következésképpen a

$$\sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} A^v \quad \text{és} \quad \sum_{v=1}^{\infty} \frac{(-1)^{v-1}}{v} (A - E)^v$$

hatványsorok valamennyi  $A$ -ra, ill. az  $|A - E| < 1$  feltételt teljesítő valamennyi  $A$ -ra konvergálnak. (Az utóbbi határ pontos; a

$$H = \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{vmatrix}$$

<sup>7</sup> Összefüggőnek akkor nevezünk speciálisan valamely halmazt, ha annak bármely, két nem-üres részhalmazra való felbontásakor ezen részeknek legalább az egyike tartalmazza a másiknak egy torlódási pontját (Hausdorff). Egy halmaz valamely pontjának komponense ezen halmaz legnagyobb összefüggő részhalmaza, amely tartalmazza ezt a pontot.



mátrix esetében nyilván  $|H| = 1$  és  $H^2 = H$ , úgyhogy a második sor  $A = E - H$ -ra divergál.<sup>8</sup> E sorok összegét jelölje  $\exp A$ , ill.  $\ln A$ . (Az  $\exp A$  jelölést a nehézkesebb  $e^A$  helyett használjuk.)

Hatványsoraink konvergenciája  $|A| \leq a$  ( $a > 0$ ), ill.  $|A - E| \leq a$  ( $0 < a < 1$ ) mellett nyilvánvalóan egyenletes, és az egyes tagok mindenütt folytonosak, úgyhogy mind a két függvény az egész értelmezési tartományban mindenütt folytonos. (Az  $\exp A$  függvény mindenütt definiálva van,  $\ln A$  csak  $|A - E| < 1$  esetén.<sup>9</sup> Ehhez kapcsolódva mindjárt két pontosabb becslést adunk meg az  $\exp$  és  $\ln$  függvények nagyságára és ingadozására vonatkozóan.

Először

$$|\exp A - E| \leq e^{|A|} - 1, \quad |\ln A| \leq \ln \frac{1}{1 - |A - E|} \quad (|A - E| < 1).$$

Mind a két becslés közvetlenül következik a hatványsor-előállításból.

Másodszor,  $|A| \leq a$ ,  $|B| \leq a$  ( $a > 0$ ), ill.  $|A - E| \leq a$ ,  $|B - E| \leq a$  ( $0 < a < 1$ ) mellett

$$|\exp A - \exp B| \leq e^a |A - B|, \quad |\ln A - \ln B| = \frac{1}{1 - a} |A - B|.$$

Ahhoz, hogy ezt bebizonyíthassuk, először a következő segédképlet helyességét kell belátnunk:  $|A| \leq a$ ,  $|B| \leq a$  ( $a > 0$ ) mellett következik

$$|A^p - B^p| \leq pa^{p-1} |A - B| \quad (p = 0, 1, 2, \dots)$$

fennállása. Ha  $p = 0, 1$ , akkor az állítás helyessége nyilvánvaló;  $p$ -ről pedig a következőképpen vihető át  $p + 1$ -re (anélkül, hogy felhasználnánk a felcserélhetőséget!)

$$\begin{aligned} |A^{p+1} - B^{p+1}| &= |(A^p - B^p)A + B^p(A - B)| \\ &\leq |A^p - B^p| |A| + |B|^p |A - B| \\ &\leq p \cdot a^{p-1} |A - B| \cdot a + a^p \cdot |A - B| = (p + 1)a^p |A - B|. \end{aligned}$$

Az állított képletek pedig e segédképlet tekintetbevételével azonnal következnek  $\exp$  és  $\ln$  hatványsor előállításából.

<sup>8</sup>  $E - H$  szinguláris pontja  $\ln A$ -nak; ha ugyanis  $A = E - \vartheta H$ ,  $0 < \vartheta < 1$ , úgy  $\ln A = H \ln(1 - \vartheta)$ , ami  $\vartheta \rightarrow 1$  esetén végtelenné válik.

<sup>9</sup> Természetesen lehetséges volna  $\ln A$ -t analitikusan folytatni; e függvény általános elmélete meglehetősen bonyolult. (Az pl. kontinuumszorosan többértékű.) Említésre érdemes a következő sorfejtés, mely  $|A - E| < 1$ -en túl is konvergál:

$$\ln A = \sum_{v=1}^{\infty} \frac{2}{2v-1} \left( \frac{A-E}{A+E} \right)^{2v-1}.$$

Itt  $\frac{A-E}{A+E}$ -n  $(A-E) \cdot (A+E)^{-1}$  és  $(A+E)^{-1} \cdot (A-E)$  közös értéke értendő. A sor

$$\left| \frac{A-E}{A+E} \right| < 1$$

mellett konvergál.



## 4. §

Most megmutatjuk, hogy az  $\exp$  és  $\ln$  függvények egymás megfordításai, azaz fennállnak az

$$\exp \ln A = A, \quad \ln \exp A = A$$

relációk. Természetesen itt a  $\ln$  függvénynek értelmezve kell lennie, vagyis az első esetben teljesülnie kell az  $|A - E| < 1$  feltételnek, a második esetben pedig  $|\exp A - E| < 1$ -nek kell fennállnia. Az utóbbi egyenlőtlenség  $|A| < \ln 2$  mellett bizonyosan teljesül:

$$|\exp A - E| \leq e^{|A|} - 1 < e^{\ln 2} - 1 = 1.$$

A fenti összefüggéseket tehát az  $|A - E| < 1$ , ill. az  $|A| < \ln 2$  feltevés mellett fogjuk igazolni.

Az

$$\exp \ln A - A, \quad \ln \exp A - A$$

kifejezések eltűnése bizonyítandó tehát. Minthogy ezeknek a függvényeknek a hatványsora konvergens (az  $A$ -ra vonatkozóan tett feltevések értelmében), azok határértékei a

$$\sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} \left( \sum_{v=1}^s \frac{(-1)^{v-1}}{v} (A-E)^v \right)^\mu - A$$

ill. a

$$\sum_{\mu=1}^r \frac{(-1)^{\mu-1}}{\mu} \left( \sum_{v=1}^s \frac{1}{v!} A^v \right)^\mu - A$$

kifejezésnek, ha itt először  $s$ , azután  $r$  végtelenhez tart. Mindenesetre elegendő tehát, ha megmutatjuk, hogy ez utóbbi kifejezések elég nagy  $s, r$  esetén tetszőlegesen kicsinyek lesznek, azaz: hogy bármely  $\varepsilon$  pozitív számhoz létezik olyan  $t = t(\varepsilon)$ , hogy  $s \geq t, r \geq t$  mellett következik, hogy ezek a kifejezések abszolútértékben kisebbek  $\varepsilon$ -nál.

Ezekkel a kifejezésekkel, minthogy az  $A$  és  $A - E$  mátrixok bennük — kizárólagosan — előforduló hatványai egymás között felcserélhetők, ugyanúgy számolhatunk, mint a közönséges számok polinomjaival. Nyilvánvalóan az  $A - E$ , ill. az  $A$  mátrix  $rs$ -ed fokú polinomjaival állunk itt szemben.

Ha  $r \geq t, s \geq t$ , úgy a hatványok együtthatói a  $t$ -edikig bezárólag megegyeznek

$$e^{\ln(1+x)} - 1 - x, \quad \text{ill.} \quad \ln e^x - x$$

sorfejtési együtthatóival (itt  $x$ -et számnak gondoljuk!), azaz eltűnnek. Azonkívül valamennyi együttható abszolútértékben  $\leq$

$$\sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \left( \sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{v} x^v \right)^\mu + 1 + x = e^{\ln \frac{1}{1-x}} + 1 + x = 1 + x + \frac{1}{1-x},$$

ill.

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{\mu} \left( \sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{v!} x^v \right)^\mu + x = \ln \frac{1}{1-(e^x-1)} + x = x + \ln \frac{1}{2-e^x}$$

hatványsorának megfelelő együtthatóinál. Minthogy ezek a függvények  $|x| < 1$ ,



ill.  $|x| < \ln 2$  mellett regulárisak, hatványsoraik  $|x| < 1$ , ill.  $|x| < \ln 2$  esetén konvergensek; azaz  $0 < a < 1$ , ill.  $0 < a < \ln 2$  mellett  $x^p$  együtthatója e hatványsorok mindegyikében

$$\equiv \frac{c_a}{a^p} \quad (c_a \text{ csak } a\text{-tól függ}).$$

(Az első esetben egyébként csaknem valamennyi együttható  $= 1$ .) Méginkább érvényes ez a bennünket érdeklő kifejezések együtthatóira.

Ha  $|A - E| = a' < a < 1$ , ill.  $|A| = a' < a < \ln 2$  a bennünket érdeklő kifejezések mindegyikének abszolútértéke

$$\equiv \sum_{p=t+1}^{rs} \frac{c_a}{a^p} a'^p = c_a \sum_{p=t+1}^{rs} \left(\frac{a'}{a}\right)^p \equiv \frac{ac_a}{a-a'} \left(\frac{a'}{a}\right)^{t+1},$$

hacsak  $r, s \geq t$ . Elég nagy  $t$ -re ez tetszőlegesen kicsiny  $s$  ezzel állításunk be van bizonyítva; az nyilvánvalóan mindig igaz, ha létezik ilyen  $a$ , azaz minden  $A$ -ra, melyre  $|A - E| < 1$ , ill.  $|A| < \ln 2$ .

## 5. §

Az  $\exp(A + B) = \exp A \cdot \exp B$  összefüggés semmi esetre sem lehet igaz minden  $A$ -ra és  $B$ -re; ekkor ugyanis általánosan fennállna

$$\exp A \cdot \exp B = \exp B \cdot \exp A,$$

s így speciálisan  $|A - E| < 1$ ,  $|B - E| < 1$  mellett

$$\exp \ln A \cdot \exp \ln B = \exp \ln B \cdot \exp \ln A,$$

$$AB = BA,$$

ami pedig nyilvánvalóan hamis. Megmutatjuk azonban, hogy a fenti összefüggés minden felcserélhető  $A$ -ra és  $B$ -re fennáll.

Az  $\exp(A + B) = \exp A \cdot \exp B$  kifejezés a

$$\sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} (A+B)^\mu = \sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} A^\mu \cdot \sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} B^\mu$$

kifejezések határértéke, ha  $r \rightarrow \infty$ . Elég tehát megmutatni, hogy ezek zérushoz tartanak. Minthogy e kifejezésekkel ugyanúgy számolhatunk, mint közösleges számok polinomjaival (mivel  $A$  és  $B$  felcserélhetők), könnyű számítással kapjuk:

$$\sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} (A+B)^\mu - \sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} A^\mu \cdot \sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} B^\mu = \sum_{\substack{\mu, \nu=0 \\ \mu+\nu > r}}^r \frac{1}{\mu! \nu!} A^\mu B^\nu,$$



így tehát abszolútértékben

$$\begin{aligned}
 &\equiv \sum_{\substack{\mu, \nu=0 \\ \mu+\nu>r}}^r \frac{1}{\mu! \nu!} |A|^\mu |B|^\nu \equiv \sum_{\mu=0}^{\infty} \sum_{\nu=\frac{1}{2}r}^{\infty} \frac{1}{\mu! \nu!} |A|^\mu |B|^\nu + \sum_{\mu=\frac{1}{2}r}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\mu! \nu!} |A|^\mu |B|^\nu = \\
 &= \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{1}{\mu!} |A|^\mu \sum_{\nu=\frac{1}{2}r}^{\infty} \frac{1}{\nu!} |B|^\nu + \sum_{\mu=\frac{1}{2}r}^{\infty} \frac{1}{\mu!} |A|^\mu \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} |B|^\nu = \\
 &= e^{|A|} \sum_{\nu=\frac{1}{2}r}^{\infty} \frac{1}{\nu!} |B|^\nu + e^{|B|} \sum_{\nu=\frac{1}{2}r}^{\infty} \frac{1}{\nu!} |A|^\nu.
 \end{aligned}$$

Ez a korlát azonban  $r \rightarrow \infty$  esetén nyilvánvalóan zérushoz tart, amivel állításunkat bebizonyítottuk.

Megmutatjuk továbbá: Felcserélhető  $A$  és  $B$  esetén

$$\ln(AB) = \ln A + \ln B,$$

ha mind a három  $\ln$  értelmezve van, azaz ha

$$|A-E| < 1, |B-E| < 1 \quad \text{és} \quad |AB-E| < 1.$$

Mindenekelőtt mutassuk meg: elég, ha az állítást minden olyan felcserélhető  $A$ -ra és  $B$ -re bizonyítjuk, amelyekre fennáll:  $|A-E| < \delta$ ,  $|B-E| < \delta$  ( $\delta$  valamely pozitív állandó).

Legyen ugyanis  $|A-E| < 1$ ,  $|B-E| < 1$ ,  $|AB-E| < 1$ . Ekkor minden,  $0 \leq \vartheta \leq 1$  közbe eső  $\vartheta$ -ra fennáll:

$$|\{E + \vartheta(A-E)\} - E| = |\vartheta(A-E)| \leq |A-E| < 1,$$

$$|\{E + \vartheta(B-E)\} - E| = |\vartheta(B-E)| \leq |B-E| < 1,$$

továbbá

$$\begin{aligned}
 &|\{E + \vartheta(A-E)\}\{E + \vartheta(B-E)\} - E| = \\
 &= |\vartheta(A-E) + \vartheta(B-E) + \vartheta^2(A-E)(B-E)| \\
 &= |\vartheta(AB-E) - (\vartheta - \vartheta^2)(A-E)(B-E)| \\
 &\leq \vartheta|AB-E| + (\vartheta - \vartheta^2)|A-E||B-E|;
 \end{aligned}$$

ez a kifejezés azonban  $\vartheta \neq 0$  esetén

$$< \vartheta \cdot 1 + (\vartheta - \vartheta^2) \cdot 1 \cdot 1 = 2\vartheta - \vartheta^2 = 1 - (1 - \vartheta)^2 \leq 1,$$

$\vartheta = 0$  esetén pedig

$$= 0 < 1$$

tehát mindenesetre  $< 1$ . Következésképpen

$$\begin{aligned}
 F(\vartheta) &= \ln \{E + \vartheta(A-E)\} \{E + \vartheta(B-E)\} - \\
 &\quad - \ln \{E + \vartheta(A-E)\} - \ln \{E + \vartheta(B-E)\}
 \end{aligned}$$



minden, a  $0 \leq \vartheta \leq 1$  közbe eső  $\vartheta$ -ra értelmezve van. Meg kell mutatnunk, hogy

$$\ln(AB) - \ln A - \ln B = F(1) = 0.$$

Mármost  $F(\vartheta)$ -ban minden  $\ln$ -hatványsor konvergens;  $F(\vartheta)$  elemeinek valós és képzetes részét tehát  $0 \leq \vartheta \leq 1$  mellett  $\vartheta$  konvergens hatványsorai — azaz analitikus függvényei — állítják elő.

S ha  $0 \leq \vartheta \leq \delta$ , akkor

$$| \{E + \vartheta(A - E)\} - E | = | \vartheta(A - E) | \leq \delta |A - E| < \delta,$$

$$| \{E + \vartheta(B - E)\} - E | = | \vartheta(B - E) | \leq \delta |B - E| < \delta,$$

és  $E + \vartheta(A - E)$ ,  $E + \vartheta(B - E)$  felcserélhetők, mivel  $A$  és  $B$  is azok. A feltevés szerint fennáll tehát:  $F(\vartheta) = 0$ . Következésképpen  $F(\vartheta)$  azonosan eltűnik, és  $F(1) = 0$ , vagyis az eredeti állítást igazoltuk.

Igazoljuk most az összefüggést, melynek elégséges voltát felismertük, a  $\delta = 1 - \sqrt{\frac{1}{2}}$  esetre.

$\ln A$  és  $\ln B$  felcserélhetők, mivel ezek  $A$ , ill.  $B$  polinomjainak limeszei, amelyeknek  $A$  és  $B$  felcserélhetősége folytán felcserélhetőeknek kell lenniök. Következésképpen

$$\exp(\ln A + \ln B) = \exp \ln A \cdot \exp \ln B = AB.$$

Továbbá

$$|A - E|, |B - E| < 1 - \sqrt{\frac{1}{2}},$$

$$|\ln A|, |\ln B| < \ln \frac{1}{1 - \left(1 - \sqrt{\frac{1}{2}}\right)} = \ln \sqrt{2} = \frac{1}{2} \ln 2,$$

$$|\ln A + \ln B| < \ln 2.$$

Fennáll tehát

$$\ln \exp(\ln A + \ln B) = \ln A + \ln B,$$

azaz

$$\ln(AB) = \ln A + \ln B.$$

## 6. §

Most rátérünk arra, hogy az 5. §-ban bebizonyított két képletből levonjuk a legkézenfekvőbb következtetéseket.

Mínthogy  $\alpha A$ ,  $\beta A$  mindenkor felcserélhetők (itt  $\alpha$  és  $\beta$  komplex számok), fennáll:

$$\exp((\alpha + \beta)A) = \exp \alpha A \exp \beta A.$$

Nevezetesen igaz általában:

$$\exp A \cdot \exp(-A) = \exp O = E,$$

$$\det \exp A \cdot \det \exp(tA) = \det E = 1,$$



így tehát

$$\det \exp A \neq 0, \exp(-A) = (\exp A)^{-1}.$$

(A  $\det \exp A \neq 0$  egyenlőtlenséget nyilvánvalóvá teszi a

$$\det \exp A = e^{\text{Spur } A}$$

összefüggés. Továbbá az  $\exp A = B$  egyenlet azokra és csak azokra a  $B$ -kre oldható meg, amelyekre  $\det B \neq 0$ . E tények bizonyításával itt nem foglalkozunk.)

Ezekből az egyenletekből nyomban következik minden  $A$ -ra és a  $p=0, \pm 1, \pm 2, \dots$  értékekre:

$$\exp(pA) = (\exp A)^p.$$

Ennek a tételnek megfordítása a következő: Ha  $p=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , és

$$|A^r - E| < 1$$

minden olyan  $r$ -re, amely 1 és  $p$  közé esik (azaz ha  $1 \leq r \leq p$ , ill.  $1 \geq r \geq p$ ), úgy fennáll:

$$\ln(A^p) = p \ln A.$$

Ez minden további nélkül következik az 5. § második képletéből, ha tekintetbe vesszük, hogy  $A$  valamennyi hatványa egymás között felcserélhető.

Még közlünk néhány egyszerűen bizonyítható képletet. Fennáll:

$$\exp(S^{-1}AS) = S^{-1}(\exp A)S, \quad \ln(S^{-1}AS) = S^{-1}(\ln A)S$$

(az előbbi  $\det S \neq 0$  esetén, az utóbbi pedig  $\det S \neq 0, |A - E| < 1, |S^{-1}AS - E| < 1$  esetén). A hatványsorok részletösszegeire ugyanis (melyek polinomok) hasonló összefüggések érvényesek, következésképpen fennállnak ezek az összefüggések a részletösszegek limeszére is.

Ha  $A$  átlós mátrix, melynek átlós elemei  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ , úgy  $\exp A$  és  $\ln A$  is átlós mátrixok, mégpedig az

$$e^{\alpha_1}, e^{\alpha_2}, \dots, e^{\alpha_m}, \quad \text{ill.} \quad \ln \alpha_1, \ln \alpha_2, \dots, \ln \alpha_m$$

átlós elemekkel. (A  $\ln$  esetében természetesen teljesülnie kell az  $|A - E| < 1$  egyenlőtlenségnek; a  $\ln \alpha_\mu$  függvénynek mindig azt az ágát kell venni, amely az 1 helyen zérussal egyenlő.) Ez az állítás triviális.

## 7. §

Végül bebizonyítunk még néhány, az  $\exp$  és  $\ln$  függvények  $O$ , ill.  $E$  környezetében mutatott viselkedésére vonatkozó becslést.

Az  $O$ , ill.  $E$  mátrixok környezetében fennáll:

$$\exp A = E + A + O(|A|^2), \quad \ln A = (A - E) + O(|A - E|^2).$$



Legyen ugyanis pl.  $|A| < 1$ , ill.  $|A - E| < \frac{1}{2}$ ; ekkor fennáll:

$$\begin{aligned} |\exp A - A - E| &= \left| \sum_{v=2}^{\infty} \frac{1}{v!} A^v \right| \leq \sum_{v=2}^{\infty} \frac{1}{v!} |A|^v \leq |A|^2 \sum_{v=2}^{\infty} \frac{1}{v!} \leq |A|^2, \\ |\ln A - (A - E)| &= \left| \sum_{v=2}^{\infty} \frac{(-1)^{v-1}}{v} (A - E)^v \right| \leq \sum_{v=2}^{\infty} \frac{1}{v} |A - E|^2 \\ &= |A - E|^2 \sum_{v=2}^{\infty} \frac{1}{v} \frac{1}{2^{v-2}} \leq |A|^2, \end{aligned}$$

amivel az állítást igazoltuk.

Az  $O$  mátrix környezetében fennáll:

$$\ln(\exp A \cdot \exp B) = A + B + O(|A| |B|).$$

(Felcserélhető  $A, B$  esetén az  $O$  járulékos tag zérus!) Legyen

$$|A| < \frac{1}{2} \ln \frac{3}{2}, \quad |B| < \frac{1}{2} \ln \frac{3}{2}.$$

Ekkor

$$|\exp A - E| < e^{\frac{1}{2} \ln \frac{3}{2}} - 1 = \sqrt{\frac{3}{2}} - 1, \quad |\exp B - E| < e^{\frac{1}{2} \ln \frac{3}{2}} - 1 = \sqrt{\frac{3}{2}} - 1,$$

$$\begin{aligned} |\exp A \cdot \exp B - E| &= |(\exp A - E) + (\exp B - E) + (\exp A - E)(\exp B - E)| \\ &\leq |\exp A - E| + |\exp B - E| + |\exp A - E| |\exp B - E| \\ &< 2 \left( \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right) + \left( \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right)^2 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

és

$$|A + B| < \ln \frac{3}{2}, \quad |\exp(A + B) - E| < e^{\ln \frac{3}{2}} - 1 = \frac{1}{2}.$$

Következésképpen

$$\begin{aligned} \ln(\exp A \cdot \exp B) - A - B &= \ln(\exp A \cdot \exp B) - \ln \exp(A + B) = \\ &= O(|\exp A \cdot \exp B - \exp(A + B)|), \end{aligned}$$

tehát az  $\exp A \cdot \exp B - \exp(A + B)$  kifejezést kell megbecsülnünk. Ez

$$\sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} A^\mu \cdot \sum_{\nu=0}^r \frac{1}{\nu!} B^\nu - \sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} (A+B)^\mu$$

limesze, ha  $r \rightarrow \infty$ . Ha elvégezzük a szorzást (ez alkalommal anélkül, hogy a felcserélhetőséget, melyet nem feltételeztünk, kihasználnánk), úgy először is valamennyi  $A^\mu$  és  $B^\nu$  tag nyilvánvalóan kiesik. Most a többi tagot (melyek mind  $A$ -t, mind  $B$ -t tartalmazzák) szeretnénk megbecsülni.

Hány olyan tag van, amelyben az  $A$  mátrix  $\varrho$ -szor, a  $B$  mátrix  $\sigma$ -szor lép fel mint tényező? ( $\varrho + \sigma \leq r$ .)



Elvégezve a

$$\sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} A^\mu \sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} B^\mu$$

szorzást, nyilvánvalóan egyetlenegy ilyen tagot kapunk, mégpedig az  $\frac{1}{\varrho! \sigma!}$  együtthatóval. Ha a

$$\sum_{\mu=0}^r \frac{1}{\mu!} (A+B)^\mu$$

kifejezésben végezzük el a szorzásokat, a keresett tagok valamennyien  $\frac{1}{(\varrho+\sigma)!} (A+B)^{\varrho+\sigma}$ -ból származnak, s itt  $\frac{(\varrho+\sigma)!}{\varrho! \sigma!}$  ilyen tag lép fel, mindegyikük az  $\frac{1}{(\varrho+\sigma)!}$  együtthatóval. Valamennyi típusú tag összegének abszolútértéke eszerint

$$\equiv \frac{1}{\varrho! \sigma!} |A|^\varrho |B|^\sigma + \frac{(\varrho+\sigma)!}{\varrho! \sigma!} \frac{1}{(\varrho+\sigma)!} |A|^\varrho |B|^\sigma = \frac{2}{\varrho! \sigma!} |A|^\varrho |B|^\sigma.$$

Az egész kifejezés abszolútértéke tehát

$$\equiv \sum_{\varrho, \sigma=1}^{\infty} \frac{2}{\varrho! \sigma!} |A|^\varrho |B|^\sigma = 2(e^{|A|} - 1)(e^{|B|} - 1).$$

Ez minden  $r$ -re igaz, s így igaz az  $r \rightarrow \infty$  limeszben is; kapjuk tehát:

$$|\exp A \cdot \exp B - \exp(A+B)| \leq 2(e^{|A|} - 1)(e^{|B|} - 1) = O(|A| |B|).$$

Innen nyomban következik:

$$|\ln(\exp A \cdot \exp B) - A - B| = O(|A| |B|),$$

amivel állításunkat bebizonyítottuk.

## II. Csoportok és infinitezimális csoportjaik

### 1. §

Csoportnak nevezünk, mint általában szokás, valamely  $\mathfrak{G}$  halmazt  $\mathfrak{R}_m$ -ben (azaz: a mátrixok valamely halmazát), amely a következő tulajdonságú:

a)  $E$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez.

b) Ha  $A$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez, úgy  $\det A \neq 0$  és  $A^{-1}$  ugyancsak  $\mathfrak{G}$ -hez tartozik.

c) Ha  $A$  és  $B$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez, úgy  $AB$  is  $\mathfrak{G}$ -hez tartozik.

$\mathfrak{G}$  burkoló halmazának nevezzük  $\mathfrak{G}$  összes elemének és összes el nem tűnő determinánsú torlódási pontjának  $\mathfrak{G}$  halmazát.

$\mathfrak{G}$  nyilvánvalóan szintén csoport és önmagának burkoló halmaza. (Vegyük azonban tekintetbe, hogy  $\mathfrak{G}$ -nak korántsem kell „zárt”-nak lennie abban az értelemben, ahogy ezt a szót a folytonos csoportok elméletében használjuk;  $\mathfrak{G}$ -nak nem kell korláatosnak és zártnak lennie.)



A  $\mathfrak{G}$  csoport  $\mathfrak{I}$  infinitezimális csoportjának azon  $U$  mátrixok halmazát nevezzük, amelyekhez létezik a  $\mathfrak{G}$ -hez tartozó  $A_1, A_2, \dots$  mátrixoknak egy sorozata, valamint a 0-hoz tartó  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  pozitív számok egy sorozata, úgyhogy

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) \rightarrow U,$$

ha  $p \rightarrow \infty$ .

Könnyű belátni:  $\mathfrak{G}$ -nek és  $\overline{\mathfrak{G}}$ -nak ugyanaz az infinitezimális csoportja. A  $\mathfrak{G}$  csoportot ugyanis  $\overline{\mathfrak{G}}$  magában foglalja, így tehát infinitezimális csoportja is benne foglaltatik  $\overline{\mathfrak{G}}$  infinitezimális csoportjában. Még hátra van, hogy megmutassuk: minden  $U$ -nak, mely hozzátartozik  $\overline{\mathfrak{G}}$  infinitezimális csoportjához, hozzá kell tartoznia  $\mathfrak{G}$  infinitezimális csoportjához is.

Az  $A_1, A_2, \dots$  mátrixok tartozzanak tehát  $\overline{\mathfrak{G}}$ -hoz,  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  legyen egy zérushoz tartó pozitív számokból álló sorozat, és legyen

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) \rightarrow U,$$

ha  $p \rightarrow \infty$ . Minden egyes  $p$ -hez kiválasztunk  $\mathfrak{G}$ -ből egy  $A'_p$ -t, úgyhogy

$$|A'_p - A_p| < \varepsilon_p^2$$

teljesüljön; ez lehetséges, mert  $A_p$  hozzátartozik  $\overline{\mathfrak{G}}$ -hoz. Ekkor a  $\mathfrak{G}$ -ből kiválasztott  $A'_1, A'_2, \dots$  sorozatra fennáll:

$$\left| \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) - \frac{1}{\varepsilon_p} (A'_p - E) \right| = \left| \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - A'_p) \right| < \varepsilon_p,$$

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) - \frac{1}{\varepsilon_p} (A'_p - E) \rightarrow 0,$$

ha  $p \rightarrow \infty$ . Így tehát  $\frac{1}{\varepsilon_p} (A'_p - E)$  is  $U$ -hoz tart, azaz:  $U$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$  infinitezimális csoportjához.

## 2. §

Mielőtt tovább tanulmányozzuk az infinitezimális csoportot, két tételt kell bebizonyítanunk az  $\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E)$  sorozatokra vonatkozóan.

Először azt állítjuk: Ha adva van a mátrixoknak valamely  $A_1, A_2, \dots$  sorozata, s a zérushoz tartó pozitív számok  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  sorozata, úgy az

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) \quad \text{és} \quad \frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p$$

sorok egyikének konvergenciájából következik a másiké, és mind a kettőnek ugyanaz a limesze.



Ha ugyanis  $\frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E)$  konvergál, úgy  $\left| \frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) \right|$  korlátos, és  $|A_p - E|$  zérushoz tart, következésképpen  $\ln A_p$  majdnem minden  $p$ -re értelmezve van, és

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p &= \frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) + \frac{1}{\varepsilon_p} O(|A_p - E|^2) = \frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) + \varepsilon_p O\left(\left| \frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) \right|^2\right) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) + \varepsilon_p O(1) = \frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) + O(\varepsilon_p). \end{aligned}$$

Az első tagnak van limesze, a második tag zérushoz tart, így tehát az az összeg limesze ugyanaz, mint az első tagé.

Ha — megfordítva — az  $\frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p$  sor konvergens, úgy  $\left| \frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p \right|$  korlátos, és

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) &= \frac{1}{\varepsilon_p}(\exp \ln A_p - E) = \frac{1}{\varepsilon_p} \left( \ln A_p + \frac{1}{\varepsilon_p} O(|\ln A_p|^2) \right) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p + \varepsilon_p O\left(\left| \frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p \right|^2\right) = \frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p + \varepsilon_p O(1) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p + O(\varepsilon_p). \end{aligned}$$

Az első tagnak ismét van limesze, a második tag zérushoz tart, úgyhogy az összeg limesze ugyanaz, mint az első tagé.

Ha minden  $\varepsilon > 0$  pozitív számhoz (amelyre mondjuk fennáll:  $\varepsilon \leq \varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_0 > 0$ ) hozzá van rendelve egy  $A$  mátrix, úgy az

$$\frac{1}{\varepsilon}(A_\varepsilon - E) \quad \text{és} \quad \frac{1}{\varepsilon} \ln A_\varepsilon$$

sorok valamelyikének konvergenciája ( $\varepsilon \rightarrow 0$  esetén) ugyancsak maga után vonja a másik konvergenciáját, és limeszük közös. Ahhoz, hogy ezt belássuk, csak azt kell tekintetbe vennünk, hogy itt a konvergencia  $\varepsilon \rightarrow 0$  mellett ezt jelenti: a sor minden, zérushoz tartó  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  sorozat esetén konvergál.

Második állításunk a  $\mathfrak{G}$  csoportra vonatkozik és a következőképpen hangzik: Ha létezik a  $\mathfrak{G}$ -hez tartozó mátrixoknak egy  $A_1, A_2, \dots$  sorozata, és a 0-hoz tartó pozitív számoknak egy  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  sorozata, úgyhogy

$$\frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) \rightarrow U,$$

akkor minden  $0 < \varepsilon \leq 1$  számhoz hozzárendelhető egy  $\mathfrak{G}$ -hez tartozó  $A_\varepsilon$  mátrix, úgyhogy

$$\frac{1}{\varepsilon}(A_\varepsilon - E) \rightarrow U,$$

ha  $\varepsilon \rightarrow 0$ .



Kényelmesebb azonban a fentiekkel teljesen egyenértékű

$$\frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p \quad \text{és} \quad \frac{1}{\varepsilon} \ln A_\varepsilon$$

sorozatokot tekinteni.

Minden  $0 < \varepsilon \leq 1$  számhoz keresünk egy-egy  $p(\varepsilon) = 1, 2, \dots$  számot oly módon, hogy

$$\varepsilon_{p(\varepsilon)} < \varepsilon^2$$

legyen; válasszuk továbbá  $q(\varepsilon)$ -t ( $q(\varepsilon) = 1, 2, \dots$ ) úgy, hogy

$$(q(\varepsilon) - 1) \varepsilon_{p(\varepsilon)} < \varepsilon^2 \leq q(\varepsilon) \varepsilon_{p(\varepsilon)}$$

teljesüljön. Ha  $\varepsilon$  zérushoz tart,  $\varepsilon_{p(\varepsilon)}$  szintén 0-hoz konvergál (minthogy  $< \varepsilon^2$ ); így tehát  $p(\varepsilon) \rightarrow \infty$ . S minthogy

$$q(\varepsilon) \geq \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{p(\varepsilon)}} > \frac{1}{\varepsilon},$$

$q(\varepsilon)$  is  $\infty$ -hez tart.

Definiáljuk továbbá a

$$B_\varepsilon = (A_{p(\varepsilon)})^{p(\varepsilon)}$$

mátrixot.

Minthogy az  $A_{p(\varepsilon)}$  mátrix  $\mathfrak{G}$ -hez tartozik,  $B_\varepsilon$  ugyancsak hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez.

Minthogy  $\frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p$  konvergál, szükségképpen korlátos; fennáll tehát:

$$\frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p = O(1), \quad \ln A_p = O(\varepsilon_p),$$

$$q(\varepsilon) \ln A_{p(\varepsilon)} = O(q(\varepsilon) \varepsilon_{p(\varepsilon)}) = O(\varepsilon).$$

Minden elég kicsiny  $\varepsilon$ -ra fennáll tehát:

$$|q(\varepsilon) \ln A_{p(\varepsilon)}| < \ln 2,$$

következésképpen  $r = 1, 2, \dots, q(\varepsilon)$  minden értékére

$$|r \ln A_{p(\varepsilon)}| < \ln 2,$$

$$|\exp(r \ln A_{p(\varepsilon)}) - E| < e^{\ln 2} - 1 = 1.$$

Minthogy

$$\exp(r \ln A_{p(\varepsilon)}) = (\exp \ln A_{p(\varepsilon)})^r = (A_{p(\varepsilon)})^r,$$

$r = 1, 2, \dots, q(\varepsilon)$  valamennyi értékére kapjuk tehát:

$$|(A_{p(\varepsilon)})^r - E| < 1.$$

Ezen egyenlőtlenség folytán

$$\ln B_\varepsilon = \ln (A_{p(\varepsilon)})^{q(\varepsilon)} = q(\varepsilon) \ln A_{p(\varepsilon)},$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \ln B_\varepsilon = \frac{q(\varepsilon)}{\varepsilon} \ln A_{p(\varepsilon)} = \frac{q(\varepsilon) \varepsilon_{p(\varepsilon)}}{\varepsilon} \cdot \frac{1}{\varepsilon_{p(\varepsilon)}} \ln A_{p(\varepsilon)}.$$



Ha  $\varepsilon \rightarrow 0$ , mint tudjuk,  $p(\varepsilon)$  és  $q(\varepsilon)$  végtelenhez tart; a második tényező tehát  $U$ -hoz konvergál. Az első tényező pedig

$$\cong 1, \quad \cong \frac{q(\varepsilon)}{q(\varepsilon) - 1},$$

az tehát 1-hez tart. Így

$$\frac{1}{\varepsilon} \ln B_\varepsilon \rightarrow U,$$

azaz állításunkat bebizonyítottuk.

### 3. §

A 2. § második eredményéből következik: Ha  $U$  eleme  $\mathfrak{I}$ -nek, és a zérushoz tartó  $\eta_1, \eta_2, \dots$  pozitív számok sorozata tetszőlegesen adott, úgy létezik a  $\mathfrak{G}$ -hez tartozó mátrixoknak olyan  $A_1, A_2, \dots$  sorozata, hogy a mondott  $\eta_1, \eta_2, \dots$  számokkal fennáll:

$$\frac{1}{\eta_p} (A_p - E) \rightarrow U.$$

Válasszuk ki ugyanis először a  $B_\varepsilon$ -okat  $\mathfrak{G}$ -ből oly módon, hogy

$$\frac{1}{\varepsilon} (B_\varepsilon - E) \rightarrow U$$

(ha  $\varepsilon \rightarrow 0$ ), majd legyen  $A_p = B_{\eta_p}$ .

Ezen eredmény alapján nehézség nélkül elemezhetjük  $\mathfrak{I}$  legfontosabb tulajdonságait.

Azt állítjuk: Ha az  $U, V$  mátrixok  $\mathfrak{I}$ -hez tartoznak, úgy az  $\alpha U$  ( $\alpha$  tetszőleges valós szám),  $U + V$ ,  $UV - VU$  mátrixok ugyancsak hozzátartoznak  $\mathfrak{I}$ -hez. (Az, hogy  $\mathfrak{I}$ -nek egyáltalán vannak elemei, világos:  $O$  hozzátartozik, minthogy  $A_p$  választható  $E$ -vel egyenlőnek;  $\varepsilon_p$  legyen mondjuk egyenlő  $1/p$ -vel.)

Ahhoz, hogy ezt bebizonyítsuk, válasszunk egy zérushoz tartó pozitív számokból álló  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  sorozatot, és válasszunk ehhez  $\mathfrak{G}$ -ből olyan  $A_1, A_2, \dots$  és  $B_1, B_2, \dots$  mátrixokat, hogy

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) \rightarrow U, \quad \frac{1}{\varepsilon_p} (B_p - E) \rightarrow V.$$

(Az  $\varepsilon_p$  számok értéke számunkra lényegtelen, fontos azonban, hogy  $U$ -hoz és  $V$ -hez ugyanazok az  $\varepsilon_p$  értékek tartoznak.)

Ekkor ha  $\alpha \neq 0$ , az ugyancsak zérushoz tartó  $\frac{1}{\alpha} \varepsilon_1, \frac{1}{\alpha} \varepsilon_2, \dots$  sorozatra fennáll:

$$\frac{1}{\frac{1}{\alpha} \varepsilon_p} (A_p - E) \rightarrow \alpha U,$$

úgyhogy  $\alpha U$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez. Ha  $\alpha = 0$ , az  $\alpha U = O$  mátrix ugyancsak  $\mathfrak{I}$ -hez tartozik.



Másodszor, az  $A_p B_p$  mátrixok is hozzátartoznak  $\mathfrak{G}$ -hez, és

$$\begin{aligned}\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p B_p - E) &= \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) + \frac{1}{\varepsilon_p} (B_p - E) + \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E)(B_p - E) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) + \frac{1}{\varepsilon_p} (B_p - E) + \varepsilon_p \cdot \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) \cdot \frac{1}{\varepsilon_p} (B_p - E).\end{aligned}$$

Ez a kifejezés nyilvánvalóan  $U + V + O \cdot U \cdot V = U + V$ -hez tart, úgyhogy  $U + V$  is  $\mathfrak{J}$ -hez tartozik.

Harmadszor, képezzük az  $A_p B_p A_p^{-1} B_p^{-1}$  mátrixokat, melyek ugyancsak  $\mathfrak{G}$ -hez tartoznak;

$$\frac{1}{\varepsilon_p^2} (A_p B_p A_p^{-1} B_p^{-1} - E) \rightarrow UV - VU$$

fennállását kívánjuk bizonyítani, amivel azután bebizonyítottuk, hogy  $UV - VU$  is  $\mathfrak{J}$ -hez tartozik.

Itt  $A_p - E$  és  $B_p - E$  zérushoz tart,  $A_p$  és  $B_p$  tehát  $E$ -hez, s ugyanez áll  $A_p^{-1} B_p^{-1}$ -re is. Minthogy

$$\frac{1}{\varepsilon_p^2} (A_p B_p A_p^{-1} B_p^{-1} - E) = \frac{1}{\varepsilon_p^2} (A_p B_p - B_p A_p) \cdot A_p^{-1} B_p^{-1}$$

elegendő tehát, ha

$$\frac{1}{\varepsilon_p^2} (A_p B_p - B_p A_p) \rightarrow UV - VU$$

fennállását bizonyítjuk. Ennek helyességéről azonban könnyen meggyőződhetünk:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\varepsilon_p^2} (A_p B_p - B_p A_p) &= \frac{1}{\varepsilon_p^2} ((A_p - E)(B_p - E) - (B_p - E)(A_p - E)) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) \cdot \frac{1}{\varepsilon_p} (B_p - E) - \frac{1}{\varepsilon_p} (B_p - E) \cdot \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E),\end{aligned}$$

amiből az állítás minden további nélkül következik.

#### 4. §

Válasszunk ki  $\mathfrak{J}$ -ből annyi lineárisan független elemet, amennyit csak lehet. A lineáris függetlenséget úgy értjük, hogy csak valós együtthatókat engedünk meg; a maximális szám ekkor  $2m^2$ . Legyenek ezek az elemek mondjuk  $\bar{U}_1, \bar{U}_2, \dots, \bar{U}_k$ .

Az  $\mathfrak{J}$  infinitezimális csoport minden  $U$  elemének lineárisan kell függnie ezektől:

$$U = \alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k \quad (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \text{ valós számok});$$

$\bar{U}_1, \bar{U}_2, \dots, \bar{U}_k$  lineáris függetlensége folytán az  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$  együtthatók egyértelműen meg vannak határozva. A 3. § eredményei szerint — megfordítva — minden

$$U = \alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k \quad (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \text{ valós számok})$$



is hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez. Eszerint  $\mathfrak{I}$  lineáris sokaság, melyet a lineárisan független  $\bar{U}_1, \bar{U}_2, \dots, \bar{U}_k$  elemek feszítenek ki.

Itt  $0 \leq k \leq 2m^2$ ;  $k=0$  azt jelenti, hogy  $\mathfrak{I}$  egyedül a  $O$  elemet tartalmazza.

A lineáris sokaságok között  $\mathfrak{I}$  azonban még ki van tüntetve azáltal, hogy az  $U, V$  elemekkel együtt tartalmazza azok  $UV - VU$  ún. kommutátorát is. A folytonos csoportok elméletében az infinitezimális csoportokat rendszerint ezen a tulajdonságon keresztül, a csoporttól függetlenül definiáljuk. Gyakran azonban mint magától értetődőt felteszik, hogy egy ilyen „infinitezimális csoport” a szó valódi értelmében is az, vagyis egy csoportból nyerhető. Ez a feltételezés azonban hamis, amint azt a Függelékben egy példán megmutatjuk majd.

Mi itt csak a közönséges  $\mathfrak{G}$  csoportokból nyerhető  $\mathfrak{I}$  infinitezimális csoportokkal foglalkozunk.

### III. Összefüggési viszonyok és paraméterszám

#### 1. §

Minthogy a  $\mathfrak{G}$  csoport az  $\mathfrak{R}_m$  euklideszi tér egy pontthalmaza, tanulmányozhatjuk összefüggési viszonyait.<sup>10</sup> Jelöljük  $A$  komponensét ( $A$  valamely eleme  $\mathfrak{G}$ -nek)  $\mathfrak{G}(A)$ -val.

Az

$$X' = AX \quad \text{és} \quad X' = XA$$

leképezések  $\mathfrak{G}$  folytonos leképezései önmagára, következésképpen mindkét leképezés minden egyes komponenset egy-egy komponensre képez le. Így tehát  $C$  komponense  $AC$ , ill.  $CA$  komponensébe megy át.

Ha  $A$  és  $B$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}(E)$ -hez, úgy

$$X' = AX$$

$\mathfrak{G}(E)$ -t  $\mathfrak{G}(A)$ -ra, azaz  $\mathfrak{G}(E)$ -re képezi le. Minthogy  $B$  is  $\mathfrak{G}(E)$ -hez tartozik,  $AB$  is hozzátartozik a képhez, azaz megint csak  $\mathfrak{G}(E)$ -hez. Eszerint  $\mathfrak{G}(E)$  csoport.

Ha  $S$  eleme  $\mathfrak{G}$ -nak, úgy az

$$X'' = S^{-1}XS$$

leképezést összetehetjük az

$$X' = XS, \quad X'' = S^{-1}X$$

leképezésekből; az tehát  $\mathfrak{G}(E)$ -t  $\mathfrak{G}(S^{-1} \cdot E \cdot S) = \mathfrak{G}(E)$ -re képezi le; következésképpen bármely  $A$ -ra, mely eleme  $\mathfrak{G}(E)$ -nek,  $S^{-1}AS$  is  $\mathfrak{G}(E)$ -hez tartozik.

Eszerint  $\mathfrak{G}(E)$  normálosztója  $\mathfrak{G}$ -nak,  $\mathfrak{G}(A)$  pedig  $\mathfrak{G}(E)$ -nek  $A$ -hoz tartozó mellékosztálya;  $\mathfrak{G}$  komponensei képezik a faktorcsoporthát.

Mint  $\mathfrak{G}$  komponense  $\mathfrak{G}(E)$  relatíve zárt  $\mathfrak{G}$ -ban, tartalmazza tehát valamennyi el nem tűnő determinánsú torlódási pontját.

<sup>10</sup> Vö. a <sup>7</sup> lábjegyzettel.



## 2. §

Tartozzék  $U$   $\mathfrak{I}$ -hez. Válasszunk ki egy  $A_1, A_2, \dots$  sorozatot  $\mathfrak{G}$ -ből úgy, hogy

$$p(A_p - E) \rightarrow U \quad (\text{azaz: } \varepsilon_p = 1/p),$$

vagyis

$$p \ln A_p \rightarrow U$$

legyen. Fennáll:

$$\exp(p \ln A_p) = (\exp \ln A_p)^p = (A_p)^p,$$

és  $\exp X$  az  $U$  helyen folytonos, így

$$(A_p)^p \rightarrow \exp U.$$

Minthogy minden  $(A_p)^p$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez,  $\exp U$  torlódási pontja  $\mathfrak{G}$ -nek. Amellett determinánsa  $\neq 0$ , tehát hozzátartozik:  $\overline{\mathfrak{G}}$ -hoz is.

Innen nyomban következik: ha  $U_1, U_2, \dots, U_j$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez, úgy

$$\exp(U_1) \cdot \exp(U_2) \cdot \dots \cdot \exp(U_j)$$

is hozzátartozik  $\overline{\mathfrak{G}}$ -hoz. Ennél többet állítunk azonban: hozzátartozik  $\overline{\mathfrak{G}}(E)$ -hez is.

Minden  $0 \leq \vartheta \leq 1$  értékre ugyanis  $\vartheta U_1, \vartheta U_2, \dots, \vartheta U_j$  ugyancsak hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez; következésképpen

$$F(\vartheta) = \exp(\vartheta U_1) \cdot \exp(\vartheta U_2) \cdot \dots \cdot \exp(\vartheta U_j)$$

$\overline{\mathfrak{G}}$ -hez tartozik. Van tehát egy  $\overline{\mathfrak{G}}$ -ben fekvő analitikus görbe, mely  $F(0) = E$ -t  $F(1)$ -gyel — azaz a vizsgált mátrixszal — köti össze. Annak tehát  $\overline{\mathfrak{G}}(E)$ -hez kell tartoznia.

A következőkben egyebek között ki fog tűnni, hogy  $\overline{\mathfrak{G}}(E)$ -nek más eleme nincsen.

## 3. §

Feltételezzük a  $\overline{\mathfrak{G}}$ -hoz tartozó mátrixok olyan  $A_1, A_2, \dots$  sorozatának létezését, hogy  $\ln A_p$  minden  $p$ -re értelmezve van és egyikük sem tartozik  $\mathfrak{I}$ -hez, és az  $A_p$ -k  $E$ -hez tartanak. Megmutatjuk, hogy ez lehetetlenség.

Minthogy  $O$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez,  $\ln A_p$  sohasem egyenlő  $O$ -val; írható tehát

$$|\ln A_p| = \delta_p > 0.$$

Minthogy  $\ln A_p$  nem tartozik  $\mathfrak{I}$ -hez és  $\mathfrak{I}$  mint lineáris sokaság zárt halmaz,  $\ln A_p$ -től való távolságának  $\varepsilon_p$  minimális értéke pozitív; ezt az értéket a távolság  $\mathfrak{I}$ -nek  $U_p$  pontjában vegye fel:

$$|\ln A_p - U_p| = \varepsilon_p > 0.$$

Minthogy  $O$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez, fennáll:  $\delta_p \equiv \varepsilon_p$ . Az  $A_1, A_2, \dots$  sorozat  $E$ -hez konvergál,  $\ln A_1, \ln A_2, \dots$  tehát  $O$ -hoz tart; következésképpen

$$\delta_p \rightarrow 0, \quad \varepsilon_p \rightarrow 0.$$

Így tehát  $U_p$  is  $O$ -hoz tart.



Speciálisan  $A_p$ ,  $\ln A_p$  és  $U_p$  korlátosak; levonhatjuk tehát a következtetést:

$$|\exp \ln A_p - \exp U_p| = O(|\ln A_p - U_p|) = O(\varepsilon_p),$$

$$|A_p - \exp U_p| = O(\varepsilon_p),$$

továbbá

$$\begin{aligned} |A_p \exp(-U_p) - E| &= |(A - \exp U_p) \exp(-U_p)| \\ &\equiv |A - \exp U_p| |\exp(-U_p)| = O(\varepsilon_p) O(1) = O(\varepsilon_p). \end{aligned}$$

Eszerint  $A_p \exp(-U_p)$  konvergál  $E$ -hez, ami a következő becslést motiválja:

$$|\ln(A_p \exp(-U_p))| = O(|A_p \exp(-U_p) - E|) = O(\varepsilon_p).$$

Vegyük tekintetbe, hogy  $p$ -nek csaknem minden értékére (ti. mihelyt  $U_p$  elég közel van  $O$ -hoz) szükségképpen fennáll:

$$\ln(A_p \exp(-U_p)) \neq 0$$

az ellenkező esetben ugyanis

$$A_p \exp(-U_p) = E, \quad A_p = \exp U_p,$$

$$\ln A_p = \ln \exp U_p = U_p$$

következnék. Legyen

$$|\ln(A_p \exp(-U_p))| = \eta_p > 0.$$

Megmutattuk, hogy  $\eta_p = O(\varepsilon_p)$ .

$A_p$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz,  $U_p$  és  $-U_p$   $\mathfrak{I}$ -hez tartozik, tehát  $\exp(-U_p)$  is hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz; következésképpen  $A_p \exp(-U_p)$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz. Az

$$\frac{1}{\eta_p} \ln(A_p \exp(-U_p))$$

sorozat minden eleme egységnyi abszolút értékű, kell tehát, hogy legalább egy  $W$  torlódási pontja legyen. Válasszunk ki egy  $v(1)$ ,  $v(2)$ , ... részsorozatot oly módon, hogy

$$\frac{1}{\eta_{v(p)}} \ln(A_{v(p)} \exp(-U_{v(p)})) \rightarrow W$$

$W$  tehát ugyancsak hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez.

A  $v(p)$  részsorozat és  $W$  definíciójából következik:

$$\frac{1}{\eta_{v(p)}} \ln(A_{v(p)} \exp(-U_{v(p)})) = W + o(1),$$

$$\ln(A_{v(p)} \exp(-U_{v(p)})) - \eta_{v(p)} W = o(\eta_{v(p)}).$$



Mint ahogy a bal oldalon mind a két tag zérushoz tart, azaz korlátos, a fentiekből következik:

$$\begin{aligned} |A_{v(p)} \exp(-U_{v(p)}) - \exp(\eta_{v(p)} W)| &= O(|\ln(A_{v(p)} \exp(-U_{v(p)})) - \eta_{v(p)} W|) \\ &= o(\eta_{v(p)}), \\ |A_{v(p)} - \exp(\eta_{v(p)} W) \exp U_{v(p)}| &= |(A \exp(-U_{v(p)}) - \exp(\eta_{v(p)} W)) \exp U_{v(p)}| \\ &\leq |A \exp(-U_{v(p)}) - \exp(\eta_{v(p)} W)| |\exp U_{v(p)}| \\ &= o(\eta_{v(p)}) O(1) = o(\eta_{v(p)}). \end{aligned}$$

Mint ahogy a bal oldalon mind a két tag  $E$ -hez tart, innen következik továbbá:

$$\begin{aligned} |\ln A_{v(p)} - \ln(\exp(\eta_{v(p)} W) \exp U_{v(p)})| &= O(|A_{v(p)} - \exp(\eta_{v(p)} W) \exp U_{v(p)}|) \\ &= o(\eta_{v(p)}). \end{aligned}$$

Vegyük most tekintetbe, hogy másrésről

$$\begin{aligned} |\ln(\exp(\eta_{v(p)} W) \exp U_{v(p)}) - \eta_{v(p)} W - U_{v(p)}| &= O(|\eta_{v(p)} W| |U_{v(p)}|) \\ &= O(\eta_{v(p)}) o(1) = o(\eta_{v(p)}). \end{aligned}$$

Ezt az előző eredménnyel kombinálva kapjuk:

$$|\ln A_{v(p)} - (\eta_{v(p)} W + U_{v(p)})| = o(\eta_{v(p)}) = o(\varepsilon_{v(p)}).$$

Az  $\eta_{v(p)} W + U_{v(p)}$  kifejezés azonban  $\mathfrak{I}$ -hez tartozik, mivel  $W$  és  $U_{v(p)}$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez;  $\varepsilon_{v(p)}$  definíciója szerint fenn kell, hogy álljon:

$$|\ln A_{v(p)} - (\eta_{v(p)} W + U_{v(p)})| \geq \varepsilon_{v(p)}.$$

S ez lehetetlen; mivel ugyanazon kifejezés nem lehet egyszerre  $o(\varepsilon_{v(p)})$ , valamint minden  $p$ -re  $\geq \varepsilon_{v(p)}$ .

Ezzel bebizonyítottuk, hogy feltevéseink nem férnek egymással össze.

#### 4. §

A 3. § eredménye így is megfogalmazható: Van olyan rögzített (de  $\mathfrak{G}$ -tól függő!)  $\Delta > 0$  szám, hogy  $\mathfrak{G}$  minden olyan  $A$  elemére, amelyre  $|A - E| < \Delta$  teljesül,  $\ln A$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez. Ennek azonban igen messzemenő következményei vannak.

Először is  $A = \exp(\ln A)$ , és  $\ln A$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez; a 2. § szerint  $A$  is  $\mathfrak{G}(E)$ -hez tartozik. Azaz: van  $E$ -nek egy olyan környezete, amelyben  $\mathfrak{G}(E)$  megegyezik  $\mathfrak{G}$ -sal. Az 1. § szerint  $\mathfrak{G}(A)$  az

$$X' = AX$$

leképezéssel áll elő  $\mathfrak{G}(E)$ -ből; van tehát  $A$ -nak egy olyan környezete (mely  $\mathfrak{G}$  mellett  $A$ -tól is függ), amelyben  $\mathfrak{G}$  megegyezik  $\mathfrak{G}(A)$ -val.

Ezt megfogalmazhatjuk így is:  $\mathfrak{G}$ -nak minden komponense relatíve nyitott  $\mathfrak{G}$ -ban, vagy másként:  $\mathfrak{G}$  minden  $A$  eleméhez tartozik egy pozitív minimális távolság, mely azt a  $\mathfrak{G}(A)$  komponens  $\mathfrak{G}$ -beli komplementer halmazától elválasztja.



Másodszor bebizonyíthatjuk a 2. § végén kimondott állítást:  $\mathfrak{G}(E)$  minden eleme az

$$\exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j \quad (U_1, U_2, \dots, U_j \text{ elemei } \mathfrak{I}\text{-nek})$$

alakú. (Azt, hogy ezek a mátrixok valamennyien  $\mathfrak{G}(E)$ -hez tartoznak, már tudjuk.)

Legyen ugyanis  $\mathfrak{G}'$  mindezen mátrixok halmaza és  $\mathfrak{G}''$  ennek komplementer halmaza  $\mathfrak{G}(E)$ -ben. Ha  $\mathfrak{G}'$  nem egyezné meg  $\mathfrak{G}(E)$ -vel, úgy a  $\mathfrak{G}'$ ,  $\mathfrak{G}''$  halmazok egyike sem lenne üres; minthogy  $\mathfrak{G}(E)$  összefüggő, azok egyikének tartalmaznia kellene a másiknak egy torlódási pontját.

Legyen ez a pont  $A_0$ ;  $A_0$  minden esetre hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz, és  $A_0$  minden környezete tartalmaz pontokat  $\mathfrak{G}'$ -ből és  $\mathfrak{G}''$ -ből. Nyilvánvaló, hogy  $A_0$ -nak van olyan  $\mathfrak{U}$  környezete, hogy  $\mathfrak{U}$  minden  $B, C$  elemére

$$|B^{-1}C - E| < \Delta$$

(tekintettel arra, hogy  $\det A_0 \neq 0$ ).

Válasszunk  $\mathfrak{U}$ -ból egy  $\mathfrak{G}'$ -höz tartozó  $B$ -t és egy  $\mathfrak{G}''$ -höz tartozó  $C$ -t; ekkor  $B, C$  és  $B^{-1}C$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz és

$$|B^{-1}C - E| = \Delta.$$

Következésképpen

$$\ln(B^{-1}C) = V$$

$\mathfrak{I}$ -hez tartozik. Minthogy  $B$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}'$ -höz,

$$B \equiv \exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j \quad (U_1, U_2, \dots, U_j \text{ eleme } \mathfrak{I}\text{-nek}),$$

és innen következik:

$$C = B \cdot B^{-1}C = \exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j \cdot \exp V.$$

Így tehát  $C$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}'$ -hez, ellentétben a feltevéssel.

Ezzel állításunkat igazoltuk.

Minthogy  $\mathfrak{G}(A)$  az

$$X' = AX$$

leképezés útján áll elő  $\mathfrak{G}(E)$ -ből, így tehát  $\mathfrak{G}(A)$  valamennyi

$$A \cdot \exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j \quad (U_1, U_2, \dots, U_j \text{ eleme } \mathfrak{I}\text{-nek})$$

alakú mátrixnak a halmaza.

## 5. §

A  $\mathfrak{G}(A)$ -ra az imént nyert előállítás lehetővé teszi számunkra, hogy bebizonyítsuk a következő tételt:  $A$  és  $B$  akkor és csak akkor tartozik  $\mathfrak{G}$  ugyanazon komponenshez, ha egymással  $\mathfrak{G}$ -ban analitikus görbe segítségével összeköthetők.

Világos, hogy a feltétel elégséges; még a szükségességet kell megmutatnunk.

Ha  $A$  és  $B$  ugyanazon komponenshez tartozik, úgy  $B$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}(A)$ -hoz, így tehát

$$B = A \cdot \exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j \quad (U_1, U_2, \dots, U_j \text{ eleme } \mathfrak{I}\text{-nek}).$$



Legyen  $0 \leq \vartheta \leq 1$  mellett

$$F(\vartheta) = A \cdot \exp(\vartheta U_1) \cdot \exp(\vartheta U_2) \cdot \dots \cdot \exp(\vartheta U_j).$$

Ez az  $F(\vartheta)$  analitikus görbe; minthogy  $\vartheta U_1, \vartheta U_2, \dots, \vartheta U_j$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez,  $F(\vartheta)$  valamennyi pontja  $\mathfrak{G}(A)$ -hoz tartozik, s így  $\mathfrak{G}$ -hoz is, és valóban összeköti  $F(0) = A$ -t  $F(1) = B$ -vel.

Habár  $\mathfrak{G}(A)$  ezen előállítására jól áttekinthető, arra mégsem alkalmas, hogy  $\mathfrak{G}$  „paraméterszámáról” felvilágosítást adjon; sem az  $U_1, U_2, \dots, U_j$  mátrixok, sem pedig maga  $j$ , nincsenek egyértelműen meghatározva.

A paraméterszámot a következőképpen állapítjuk meg:

A  $\mathfrak{G}$  csoport minden  $A$  eleméhez található olyan  $\mathfrak{U}$  környezet, mely  $|X - E| < \delta$ -nak az

$$X' = AX$$

leképezés útján előállított képe. Az  $\mathfrak{U}$  környezet  $B$  eleme akkor és csak akkor tartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz, ha  $A^{-1}B$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz, s ez

$$|A^{-1}B - E| < \delta$$

folytán akkor és csak akkor áll fenn, ha  $\ln(A^{-1}B)$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez. Azt is mondhatjuk tehát: Van  $A$ -nak egy olyan  $\mathfrak{U}$  környezete, hogy  $\mathfrak{G}$ -nak (vagy ami nyilvánvalóan ugyanaz,  $\mathfrak{G}(A)$ -nak)  $\mathfrak{U}$ -ban fekvő részét az

$$Y = \ln(A^{-1}X), \quad X = A \exp Y$$

leképezés egy-egyértelmű módon  $\mathfrak{I}$ -nek  $O$  egy bizonyos  $\mathfrak{B}$  környezetében fekvő részére képezi le.

Az  $\mathfrak{I}$  infinitezimális csoport általános eleme  $k$  valós paraméter megadásával jellemezhető (vö. II. 4 §):

$$\alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k \quad (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \text{ tetszőleges valós számok}),$$

ahol  $\bar{U}_1, \bar{U}_2, \dots, \bar{U}_k$  lineárisan független elemei  $\mathfrak{I}$ -nek ( $k$  a lineárisan független elemek maximális száma). Eszerint kicsinyben  $\mathfrak{G}$  analitikusan leírható  $k$  számú paraméter segítségével;  $A$ -nak valamely  $\mathfrak{U}$  környezetében  $\mathfrak{G}$ -t

$$A \cdot \exp(\alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k)$$

egy-egyértelműen előállítja  $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$  valós számok a  $0, 0, \dots, 0$  bizonyos környezetében).

Az a sajátos körülmény, hogy  $\mathfrak{G}(A)$ -t kicsinyben az

$$A \cdot \exp U \quad (U \text{ eleme } \mathfrak{I}\text{-nek})$$

kifejezés kimeríti, nagyban azonban ez csak az

$$A \cdot \exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j \quad (U_1, U_2, \dots, U_j \text{ eleme } \mathfrak{I}\text{-nek})$$

kifejezésre van bizonyítva, kézenfekvővé teszi, hogy megkérdezzük: vajon nagyban is nem boldogulhatnánk-e  $j=1$ -gyel.

Azt, hogy ez nem így van, a Függelékben fogjuk megmutatni. Mindamellett könnyen lehetséges, hogy  $j=2$  már mindenkor elegendő ahhoz, hogy  $\mathfrak{G}(A)$ -t kimerítsük; ezt sem bebizonyítani, sem megcáfolni nem tudjuk.



## 6. §

Összefoglaljuk eredményeinket:

I. tétel.  $\mathfrak{I}$  lineáris sokaság, azaz létezik  $k$  lineárisan független  $\bar{U}_1, \bar{U}_2, \dots, \bar{U}_k$  mátrix ( $0 \leq k \leq 2m^2$ ), úgyhogy  $\mathfrak{I}$  az

$$\alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k \quad (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \text{ valós számok})$$

mátrixok halmaza. Ha  $\mathfrak{I}$  tartalmazza az  $U, V$  mátrixokat, úgy tartalmazza azok  $UV - VU$  kommutátorát is.

Az  $E$  mátrix  $\mathfrak{G}(E)$  komponense  $\mathfrak{G}$ -ben normálosztója  $\mathfrak{G}$ -nak; az  $A$  mátrix  $\mathfrak{G}(A)$  komponense  $\mathfrak{G}$ -ban  $\mathfrak{G}(E)$ -nek  $A$ -hoz tartozó mellékosztálya. A  $\mathfrak{G}$  csoport komponensei  $\mathfrak{G}(E)$  faktorcsoportját képezik.

A  $\mathfrak{G}(A)$  komponensek mindegyike relatíve nyitott  $\mathfrak{G}$ -ban, következésképpen  $\mathfrak{G}(E)$  faktorcsoportja  $\mathfrak{G}$ -ban diszkrét; nincs olyan el nem tűnő determinánsú  $A$ , melynek tetszőleges környezetében  $\mathfrak{G}$ -nak végtelen sok komponense volna.

$\mathfrak{G}$  két pontja,  $A$  és  $B$  akkor és csak akkor tartozik  $\mathfrak{G}$  ugyanazon komponenséhez, ha azok egy  $\mathfrak{G}$ -ban fekvő analitikus görbe segítségével összeköthetők.

$\mathfrak{G}(A)$  valamennyi

$$A \cdot \exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j \quad (U_1, U_2, \dots, U_j \text{ eleme } \mathfrak{I}\text{-nek})$$

alakú mátrix halmaza. Minden  $A$ -nak van azonban olyan  $\mathfrak{U}$  környezete, hogy itt  $\mathfrak{G}$ -t (vagy ami itt ugyanaz,  $\mathfrak{G}(A)$ -t) már az

$$A \cdot \exp U \quad (U \text{ eleme } \mathfrak{I}\text{-nek})$$

mátrixok kimerítik; az

$$Y = \ln(A^{-1}X), \quad X = A \exp Y$$

leképezés  $\mathfrak{U}$ -t egy-egyértelműen képezi le  $\mathfrak{I}$ -ben  $O$  valamely  $\mathfrak{B}$  környezetére.  $\mathfrak{G}$  tehát kicsinyben mindenütt egy-egyértelműen és analitikusan leírható  $k$  valós paraméter segítségével;  $\mathfrak{U}$ -ban mátrixai az

$$A \cdot \exp(\alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k)$$

$$(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \text{ valós számok a } 0, 0, \dots, 0 \text{ bizonyos környezetében})$$

alakban állíthatók elő.

$\mathfrak{G}(E)$  tehát  $k > 0$  mellett folytonos csoport a szó megszokott értelmében, mindazon analiticitási tulajdonságokkal, amelyeket egy ilyen csoporttól elvárunk.  $\mathfrak{G}$ -t magát csak akkor nevezhetjük a szó igazi értelmében folytonos csoportnak, ha összefüggő, azaz ha  $\mathfrak{G}(E)$  faktorcsoportja az egységre redukálódik.

Ha  $k = 0$ ,  $\mathfrak{I}$  csupán a  $O$  mátrixból áll,  $\mathfrak{G}(A)$ -nak tehát  $A$  az egyetlen eleme, azaz:  $\mathfrak{G}$  megegyezik (az egyedül  $E$ -t tartalmazó)  $\mathfrak{G}(E)$  faktorcsoportjával. Következésképpen  $\mathfrak{G}$  diszkrét csoport: nincs egyetlen el nem tűnő determinánsú torlódási pontja sem.<sup>11</sup> (Speciálisan véges vagy megszámlálható csoport, mivel egyetlen torlódási pontját sem tartalmazza.)

Ebben az esetben  $\mathfrak{G}$  diszkrét csoport a szó megszokott értelmében.

<sup>11</sup> Eltűnő determinánsú torlódási pontok nagyon könnyen felléphetnek; pl. legyen  $\mathfrak{G}$  az összes  $2^v$  ( $v = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) halmaza; ezeket a számokat felfoghatjuk mint egydimenziós mátrixokat.



## IV. Ábrázolások és folytonosság

## 1. §

Az I. tétellel megfontolásaink, melyek egyedül a  $\mathfrak{G}$  csoportra vonatkoztak, lezárultak. A következőkben  $\mathfrak{G}$  ábrázolásaival lesz dolgunk.

Legyen  $n$  egész szám:  $n=1, 2, \dots$ ;  $\mathfrak{R}_n$  mátrixai mellett foglalkozni fogunk  $\mathfrak{R}_n$  mátrixaival is. (A félreértések elkerülésére  $\mathfrak{R}_n$ -ben  $O$ ,  $E$ ,  $\ln$ ,  $\exp$  helyett a következő jeleket fogjuk alkalmazni:  $O_*$ ,  $E_*$ ,  $\ln_*$ ,  $\exp_*$ .)

A  $\mathfrak{G}$  csoport valamely  $D$  ábrázolása egy  $\mathfrak{G}$ -n értelmezett függvény, melynek értékkészlete  $\mathfrak{R}_n$ -be tartozik és amely a következő függvényegyenletnek tesz eleget:

$$D(A \cdot B) = D(A) \cdot D(B) \quad (A, B \text{ eleme } \mathfrak{G}\text{-nek}).$$

Megkívánjuk azonkívül még, hogy

$$D(E) = E_*$$

legyen; ez, amint az a mátrixokra vonatkozó egyszerű tételekből következik, nem lényeges korlátozás.<sup>12</sup>

A  $\mathfrak{G}$  csoport valamely  $D$  ábrázolásának korántsem kell feltétlenül folytonosnak lennie. Erre vonatkozóan példákat a Függelékben fogunk adni. A következőkben megmutatjuk azonban, hogy az olyan ábrázolások, amelyeknek ingadozása  $E$  környezetében kisebb, mint 1 (azaz: amelyekre létezik olyan  $\delta > 0$  és  $\bar{\eta} > 0$ , hogy a  $\mathfrak{G}$  csoport minden  $|A - E| < \delta$ -t kielégítő  $A$  mátrixára

$$|D(A) - E_*| < 1 - \bar{\eta}$$

teljesül), nem csupán mindenütt folytonosak a csoporton, és folytonosan kiterjeszthetők  $\mathfrak{G}$ -ra, hanem még ezeken messze túlmenő analiticitási tulajdonságokkal rendelkeznek.

Ez a premissza (az ingadozás  $E$  közelében  $< 1$ ) egyébként nem élesíthető lényegesen tovább; van ugyanis olyan diszkontinuus ábrázolás, melynek ingadozása  $E$  környezetében egyenlő 2-vel (vö. Függelék).

A premissza bizonyosan teljesül, ha  $D(A)$  az  $A = E$  helyen folytonos (az ingadozás  $= 0$ ); ez pedig

$$D(A) = D(AA_0)D(A_0^{-1})$$

folytán fennáll, ha  $D(A)$  a  $\mathfrak{G}$  csoport valamely  $A = A_0$  elemére folytonos. Az olyan ábrázolásoknak tehát, amelyek ezt megsértik,  $\mathfrak{G}$ -ben mindenütt diszkontinuusoknak kell lenniök.

<sup>12</sup> Minthogy mindenesetre  $D(E)^2 = D(E)$  könnyű megmutatni, hogy  $D(E)$  átlós alakra transzformálható és hogy valamennyi átlós elem  $= 1$  vagy  $0$ . Az egész ábrázolás ekvivalens tehát egy olyan ábrázolással, amelyben  $D(E)$  egyenlő a zérusokkal szegélyezett egységmátrixszal. Minthogy

$$D(A) = D(E)D(A)D(E)$$

ez a szegélyezés valamennyi  $D(A)$ -ban fellép; ha ezt elhagyjuk, olyan ábrázolást kapunk, amelyben  $D(E) = E_*$ .



## 2. §

Feltesszük tehát, hogy az 1. §-ban említett  $\bar{\delta} > 0$  és  $\bar{\eta} > 0$  létezik.  
Legyen  $p$  valamely egész szám: 1, 2, ... . Ha  $A$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez, és

$$|A - E| < \varepsilon$$

( $\varepsilon > 0$ ; később pontosan rendelkezünk  $\varepsilon$  felől), úgy fennáll:

$$|\ln A| < \ln \frac{1}{1 - \varepsilon}$$

és  $r = 1, 2, \dots, p$  minden értékére

$$|r \ln A| = r |\ln A| < p \ln \frac{1}{1 - \varepsilon},$$

$$|\exp(r \ln A) - E| < e^{p \ln \frac{1}{1 - \varepsilon}} - 1 = \frac{1}{(1 - \varepsilon)^p} - 1,$$

azaz

$$|A^r - E| < \frac{1}{(1 - \varepsilon)^p} - 1.$$

Ha tehát

$$\frac{1}{(1 - \varepsilon)^p} - 1 \leq \bar{\delta}, \quad \varepsilon \leq 1 - \frac{1}{\sqrt[p]{1 + \bar{\delta}}},$$

úgy fennáll:

$$|A^r - E| < \bar{\delta}, \quad |D(A^r) - E_*| < 1 - \bar{\eta}, \quad |(D(A))^r - E_*| < 1 - \bar{\eta}.$$

Innen először is következik

$$\ln_* (D(A))^p = p \ln_* D(A),$$

továbbá

$$|\ln_* (D(A))^p| < \ln \frac{1}{\bar{\eta}}.$$

Következésképpen

$$|\ln_* D(A)| < \frac{1}{p} \ln \frac{1}{\bar{\eta}}, \quad |D(A) - E_*| < e^{\frac{1}{p} \ln \frac{1}{\bar{\eta}}} - 1 = \sqrt[p]{\frac{1}{\bar{\eta}}} - 1.$$

Bizonyosan van olyan  $c_1 > 0$  állandó ( $c_1$  s ugyanígy  $c_2$  és  $c_3$  függetlenek  $p$ -től és  $A$ -tól), hogy mindenkor fennáll:

$$\frac{c_1}{p} \leq 1 - \frac{1}{\sqrt[p]{1 + \bar{\delta}}};$$

írható tehát:  $\varepsilon = \frac{c_1}{p}$ .



Ha  $A$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez és

$$|A - E| < c_1,$$

úgy legyen először  $A \neq E$ . Ekkor van olyan  $p = 1, 2, \dots$ , amelyre

$$\frac{c_1}{2p} \leq |A - E| < \frac{c_1}{p},$$

s következésképpen

$$|D(A) - E_*| < \sqrt[p]{\frac{1}{\eta}} - 1 \leq \frac{c_2}{p}$$

(alkalmasan választott  $c_2$  mellett), így tehát

$$\leq c_2 \cdot \frac{2}{c_1} \cdot |A - E| = c_3 |A - E|.$$

Eszerint  $|A - E| < c_1$ -ből következik  $|D(A) - E_*| < c_3 |A - E|$ , ha  $A \neq E$ . Természetesen hasonló megállapítás érvényes  $A = E$  esetén is, csak ekkor  $<$  helyére az egyenlőségi jel lép.

Ez annyit jelent, hogy  $E$  környezetében  $D(A)$  eleget tesz a Lipschitz-feltételnek; ott tehát folytonos. Ezt most az egész  $\mathfrak{G}$  csoportra ki fogjuk terjeszteni.

### 3. §

Legyen  $A_0$  a  $\mathfrak{G}$  csoport valamely pontja. Azt állítjuk:  $A_0$ -nak van olyan  $\mathfrak{U}$  környezete, amelyben (vagyis: amelynek  $\mathfrak{G}$ -vel közös részében)  $D(A)$  korlátos.

Van olyan  $\varepsilon > 0$ , hogy  $|B - A_0| < \varepsilon$  és  $|C - A_0| < \varepsilon$  fennállásából

$$|B^{-1}C - E| < \delta$$

következik (minthogy  $\det A_0 \neq 0$ ). Defináljuk  $\mathfrak{U}$ -t az  $|X - A_0| < \varepsilon$  egyenlőtlenséggel és válasszunk ki  $\mathfrak{U}$ -ból egy rögzített,  $\mathfrak{G}$ -hez tartozó  $B_0$ -t (ez lehetséges, mivel  $A_0$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hoz).

Ekkor  $\mathfrak{U}$ -ban minden  $\mathfrak{G}$ -hez tartozó  $C$ -re fennáll:

$$|B_0^{-1}C - E| < \delta, \quad |D(B_0^{-1}C) - E_*| < 1,$$

$$|D(C) - D(B_0)| = |D(B_0)(D(B_0^{-1}C) - E_*)|$$

$$\leq |D(B_0)| |D(B_0^{-1}C) - E_*| \leq |D(B_0)|,$$

$$|D(C)| \leq 2|D(B_0)|,$$

eszerint  $D(A)$  valóban korlátos  $\mathfrak{U}$ -ban.

Legyen  $\mathfrak{H}$  a  $\mathfrak{G}$  csoportnak valamely korlátos, zárt részhalmaza. Azt állítjuk:  $D(A)$  korlátos  $\mathfrak{H}$ -ban (vagyis  $\mathfrak{H}$ -nak és  $\mathfrak{G}$ -nek közös részében).

A  $\mathfrak{H}$  részhalmaz minden  $A_0$  pontja benne foglaltatik ugyanis valamely  $\mathfrak{U}$  környezetben, melyben  $D(A)$  korlátos; a  $\mathfrak{H}$  részhalmazt tehát ezek a környezetek lefedik. Minthogy  $\mathfrak{H}$  korlátos és zárt, alkalmazható a Borel-féle lefedési tétel:  $\mathfrak{H}$ -t már véges számú  $\mathfrak{U}$  lefedi. Következésképpen  $D(A)$  az egész  $\mathfrak{H}$  részhalmazon korlátos.



Innen arra következtethetünk továbbá, hogy  $D(A)$  a  $\overline{\mathfrak{H}}$  részhalmazon egyenlete-sen eleget tesz a Lipschitz-feltételnek.

Válasszuk ugyanis  $c_4$ -et úgy, hogy  $\overline{\mathfrak{H}}$ -ban mindenkor

$$|D(A)| \leq c_4$$

legyen ( $c_4$  és ugyanúgy  $c_5, c_6, \dots$  nem függenek  $A$ -tól és  $B$ -től). Továbbá  $\overline{\mathfrak{H}}$ -ban (mivel az része  $\overline{\mathfrak{G}}$ -nak) mindenkor

$$\det A \neq 0.$$

Minthogy  $\overline{\mathfrak{H}}$  zárt és korlátos, van olyan  $c_5 > 0$ , hogy  $\overline{\mathfrak{H}}$ -ban mindenütt

$$|\det A| \geq c_5.$$

Azonkívül  $\overline{\mathfrak{H}}$  korlátos volta folytán van olyan  $c_6$ , hogy  $\overline{\mathfrak{H}}$ -ban mindig teljesül:

$$|A| \leq c_6.$$

A két utóbbi egyenlőtlenségből következik, hogy létezik olyan  $c_7$ , hogy a  $\overline{\mathfrak{H}}$  részhalmaz valamennyi  $A, B$  mátrixára

$$|AB^{-1} - E| \leq c_7 |A - B|.$$

Tartozzék most  $A$  és  $B$  a  $\overline{\mathfrak{H}}$  részhalmazhoz (s egyszersmind  $\overline{\mathfrak{G}}$ -hoz). Ha

$$|A - B| < \frac{c_1}{c_7},$$

úgy

$$|AB^{-1} - E| \leq c_7 |A - B| < c_1,$$

$$|D(AB^{-1}) - E_*| \leq c_3 |AB^{-1} - E| \leq c_3 c_7 |A - B|,$$

$$\begin{aligned} |D(A) - D(B)| &= |(D(AB^{-1}) - E_*)D(B)| \leq |D(AB^{-1}) - E_*| |D(B)| \\ &\leq c_3 c_4 c_7 |A - B|. \end{aligned}$$

Ha viszont

$$|A - B| \geq \frac{c_1}{c_7},$$

úgy

$$|D(A) - D(B)| \leq 2c_4 \leq \frac{2c_4 c_7}{c_1} |A - B|.$$

Jelentse  $c_8$  a  $c_3 c_4 c_7, \frac{2c_4 c_7}{c_1}$  számok közül a nagyobbikat; ekkor  $\overline{\mathfrak{H}}$  (és  $\overline{\mathfrak{G}}$ ) bármely két  $A, B$  elemére fennáll:

$$|D(A) - D(B)| \leq c_8 |A - B|.$$



## 4. §

A 3. § végén közölt eredmények szerint  $D(A)$  nem csak az egész  $\mathfrak{G}$ -ben folytonos, hanem  $\mathfrak{G}$ -nak minden pontjában is (nem szükséges, hogy  $D(A)$  ott értelmezve legyen; értelmezve van azonban tetszőlegesen közel eső pontokban, és ingadozása 0). Következésképpen  $D(A)$  teljesen egyértelmű módon kiterjeszthető  $\mathfrak{G}$ -ra, a folytonosság sérelme nélkül.

Minthogy a kiterjesztés folytonos, a

$$D(AB) = D(A)D(B)$$

egyenlet  $\mathfrak{G}$ -nak minden  $A, B$  mátrixára érvényes marad; a kiterjesztett  $D$  tehát a  $\mathfrak{G}$  csoport ábrázolása. Az eredetileg csak  $\mathfrak{H}$  és  $\mathfrak{G}$  közös részében érvényes

$$|D(A) - D(B)| \leq c_8 |A - B|$$

összefüggésnek a folytonosság folytán az egész  $\mathfrak{H}$ -ban fenn kell állnia. (Voltaképpen nem szükséges, hogy  $\mathfrak{H}$  minden pontja torlódási pontja legyen  $\mathfrak{H}$  és  $\mathfrak{G}$  közös részének. Ezért tulajdonképpen először  $\mathfrak{G}$ -nek egy átfogóbb korlátos és zárt  $\mathfrak{H}'$  részhalmazát kell kiválasztanunk — úgyhogy  $\mathfrak{H}$ -nak és  $\mathfrak{G} - \mathfrak{H}'$ -nek ne legyen közös torlódási pontja —, s ezután  $c_8$ -at megfelelőképpen kell választanunk. Ekkor az áttérés  $\mathfrak{H}$ -ra minden további nélkül elvégezhető.)

A kiterjesztett  $D$  tehát nem csak mindenütt folytonos  $\mathfrak{G}$ -ban, hanem  $\mathfrak{G}$  minden korlátos és zárt  $\mathfrak{H}$  részhalmazában egyenletesen teljesíti a Lipschitz-feltételt.

A  $\mathfrak{G}$ -ra való kiterjesztés lehetősége lényeges módon függ a folytonosságtól; vannak ugyanis diszkontinuus ábrázolások, melyek semmilyen módon nem terjeszthetők ki  $\mathfrak{G}$ -ra (vö. Függelék). A következőkben  $D$ -n mindig a kiterjesztett ábrázolást értjük.

## V. Az infinitezimális ábrázolás és a kifejtési tétel

Megmutatjuk: Ha  $A_1, A_2, \dots$  a  $\mathfrak{G}$  csoport mátrixainak valamely sorozata,  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  pedig egy 0-hoz tartó számsorozat, úgy

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E)$$

konvergenciájából következik

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (D(A_p) - E_*)$$

konvergenciája.

Természetesen tekinthetjük ezen sorozatok helyett az

$$\frac{1}{\varepsilon_p} \ln A_p \quad \text{és} \quad \frac{1}{\varepsilon_p} \ln_* D(A_p)$$

sorozatokat (vö. II. 2. §; az ott kapott eredmények természetesen ugyanúgy érvényesek  $\mathfrak{R}_n$ -ben is). Az első sorozat határértéke legyen  $U$ . Tegyük fel, hogy adott egy  $k = 1, 2, \dots$  szám; ezt később fogjuk pontosan rögzíteni. Válasszunk ki továbbá



(ami nyilvánvalóan lehetséges) egy pozitív egész számokból álló  $q(1), q(2), \dots$  sorozatot oly módon, hogy

$$q(p) \varepsilon_p \rightarrow \frac{1}{k},$$

ha  $p \rightarrow \infty$ . Ekkor nyilvánvalóan fennáll:

$$q(p) \ln A_p \rightarrow \frac{1}{k} U,$$

és mindenestre elegendő a

$$q(p) \ln_* D(A_p)$$

sorozat konvergenciáját bizonyítani.

Válasszuk meg most  $k$ -t. Legyen

$$\left| \frac{1}{k} U \right| < \ln(1 + \bar{\delta}), \quad k > \frac{|U|}{\ln(1 + \bar{\delta})}.$$

Következésképpen minden elég nagy  $p$ -re fennáll:

$$|q(p) \ln A_p| < \ln(1 + \bar{\delta});$$

innen  $r = 1, 2, \dots, q(p)$  minden értékére következik:

$$|r \ln A_p| \leq |q(p) \ln A_p| < \ln(1 + \bar{\delta}),$$

$$|\exp(r \ln A_p) - E| < e^{\ln(1 + \bar{\delta})} - 1 = \bar{\delta},$$

$$|A_p^r - E| < \bar{\delta}.$$

Innen következik továbbá

$$|D(A_p^r) - E_*| < 1, \quad |(D(A_p))^r - E_*| < 1,$$

valamint

$$\ln_* D(A_p^{q(p)}) = \ln_* (D(A_p))^{q(p)} = q(p) \ln_* D(A_p).$$

Elegendő tehát az  $\ln_* D(A_p^{q(p)})$  sorozat konvergenciáját bizonyítani.

A

$$q(p) \ln A_p \rightarrow \frac{1}{k} U$$

relációból következik:

$$\exp(q(p) \ln A_p) \rightarrow \exp\left(\frac{1}{k} U\right),$$

$$A_p^{q(p)} \rightarrow \exp\left(\frac{1}{k} U\right).$$

Az  $A_p$  mátrixok, így tehát az  $A_p^{q(p)}$ -k is,  $\mathfrak{G}$ -hoz tartoznak;  $\exp\left(\frac{1}{k} U\right)$  tehát torló-dási pontja  $\mathfrak{G}$ -nak. Továbbá  $\exp\left(\frac{1}{k} U\right)$  determinánsa semmiképpen nem zérus;



$\exp\left(\frac{1}{k}U\right)$  tehát  $\mathfrak{G}$  burkoló halmazához, azaz magához  $\mathfrak{G}$ -hoz tartozik. Következésképpen  $D(A)$  az  $\exp\left(\frac{1}{k}U\right)$  helyen értelmezve van és folytonos, úgyhogy

$$D(A_p^{q(p)}) \rightarrow D\left(\exp\left(\frac{1}{k}U\right)\right).$$

Fennáll továbbá:

$$\left|\frac{1}{k}U\right| < \ln(1+\delta), \quad \left|\exp\left(\frac{1}{k}U\right) - E\right| < e^{\ln(1+\delta)} - 1 = \delta,$$

$$\left|D\left(\exp\left(\frac{1}{k}U\right)\right) - E_*\right| < 1,$$

$\ln_* A$  tehát a  $D\left(\exp\left(\frac{1}{k}U\right)\right)$  helyen értelmezve van és folytonos. Ebből pedig következik:

$$\ln_* D(A_p^{q(p)}) \rightarrow \ln_* D\left(\exp\left(\frac{1}{k}U\right)\right),$$

$$q(p) \ln_* D(A_p) \rightarrow \ln_* D\left(\exp\left(\frac{1}{k}U\right)\right),$$

amivel állításunkat bebizonyítottuk. (Már most kiszámíthatnánk a határértékeket; mindamellett meghatározásukat később, rendkívül egyszerűen végezzük el.)

## 2. §

Legyen  $U$  az  $\mathfrak{I}$  infinitezimális csoport valamely eleme. Tekintsük mindazon  $\mathfrak{G}$ -hoz tartozó  $A_1, A_2, \dots$  sorozatokat, amelyekhez található olyan  $0$ -hoz tartó  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  pozitív számsorozat, hogy

$$\frac{1}{\varepsilon_p}(A_p - E) \rightarrow U.$$

Mindezen sorozatokra az

$$\frac{1}{\varepsilon_p}(D(A_p) - E_*)$$

sorozatnak is van limesze, mégpedig mindegyikre ugyanaz; két ilyen sorozat ugyanis mindenkor összetehető eggyé. Ez a határérték tehát csak  $U$ -tól függ, s azt  $J(U)$ -val jelöljük. Eszerint  $J$  az  $\mathfrak{I}$  infinitezimális csoporton van értelmezve; az a  $D$ -hez tartozó infinitezimális ábrázolás.



Vizsgáljuk meg most közelebbről  $J$  tulajdonságait.

Legyen  $U$  és  $V$  az  $\mathfrak{I}$  infinitezimális csoport két eleme,  $\alpha$  pedig egy valós szám. Válasszunk egy 0-hoz tartó  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  sorozatot; ekkor létezik  $\mathfrak{G}$ -ban két olyan  $A_1, A_2, \dots$  és  $B_1, B_2, \dots$  sorozat, hogy

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - E) \rightarrow U, \quad \frac{1}{\varepsilon_p} (B_p - E) \rightarrow V.$$

Természetesen ekkor

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (D(A_p) - E_*) \rightarrow J(U), \quad \frac{1}{\varepsilon_p} (D(B_p) - E_*) \rightarrow J(V).$$

A II. 3. §-ban bebizonyítottuk, hogy ekkor

$$\frac{1}{\frac{1}{\alpha} \varepsilon_p} (A_p - E) \rightarrow \alpha U,$$

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p B_p - E) \rightarrow U + V,$$

$$\frac{1}{\varepsilon_p^2} (A_p B_p A_p^{-1} B_p^{-1} - E) \rightarrow UV - VU.$$

Szó szerint ugyanúgy következtethetünk az

$$\frac{1}{\frac{1}{\alpha} \varepsilon_p} (D(A_p) - E_*) \rightarrow \alpha J(U),$$

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (D(A_p B_p) - E_*) = \frac{1}{\varepsilon_p} (D(A_p) D(B_p) - E_*) \rightarrow J(U) + J(V),$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_p^2} (D(A_p B_p A_p^{-1} B_p^{-1}) - E_*) &= \frac{1}{\varepsilon_p^2} (D(A_p) D(B_p) D(A_p)^{-1} D(B_p)^{-1} - E_*) \\ &\rightarrow J(U) J(V) - J(V) J(U) \end{aligned}$$

összefüggések fennállására. Eszerint

$$J(\alpha U) = \alpha J(U) \quad (\alpha \text{ valós}),$$

$$J(U + V) = J(U) + J(V),$$

$$J(UV - VU) = J(U)J(V) - J(V)J(U).$$

(Az első összefüggés eredetileg mindenesetre csak  $\alpha \neq 0$  esetén érvényes. Ha azonban ide behelyettesítjük pl. az  $\alpha = 1$  és  $\alpha = -1$  értékeket, majd alkalmazzuk a második összefüggést, következik az első érvényessége  $\alpha = 0$ -ra is.)



Ha  $\mathfrak{I}$ -t pl.  $\bar{U}_1, \bar{U}_2, \dots, \bar{U}_k$  kifeszíti, úgy  $\mathfrak{I}$  minden  $U$  eleme egyértelműen előállítható az

$$U = \alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k \quad (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \text{ valós})$$

alakban; ekkor fennáll:

$$J(U) = \alpha_1 J(\bar{U}_1) + \alpha_2 J(\bar{U}_2) + \dots + \alpha_k J(\bar{U}_k).$$

Minthogy az  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$  számokat  $U$  egyértelműen meghatározza, azok lineáris kifejezései  $U$  valós és képzetes részének; ugyanez érvényes (minthogy  $J(\bar{U}_1), J(\bar{U}_2), \dots, J(\bar{U}_k)$  konstans mátrixok)  $J(U)$  valós és képzetes részére. Azaz:  $J(U)$  lineáris függvénye  $U$ -nak. Speciálisan folytonos tehát és akárhányszor differenciálható.

A linearitás csupán  $J$  két első tulajdonságával van összefüggésben, a harmadik tulajdonság:

$$J(UV - VU) = J(U)J(V) - J(V)J(U)$$

további, igen hatékony korlátozást jelent. Az ábrázoláselméletben sokszor ez képezi a kiindulópontot valamennyi  $J$ , és így valamennyi  $D$  meghatározásához.

### 3. §

A 2. § eredményei alapján ki fogjuk tudni mutatni, hogy a  $D(A)$  ábrázolás  $\mathfrak{G}$  bármely  $A_0$  pontjának környezetében hatványsor segítségével előállítható. (A hatványsor  $U$  elemeinek valós és képzetes része szerint halad.) Ehhez segítségül kell hívnunk az egész I. tételt: rendelkezésünkre kell, hogy álljon  $\mathfrak{G}$  előállítására az

$$A_0 \cdot \exp(\alpha_1 \bar{U}_1 + \alpha_2 \bar{U}_2 + \dots + \alpha_k \bar{U}_k) \quad (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \text{ valós})$$

alakban  $A_0$  (ill.  $0, 0, \dots, 0$ ) valamely környezetében.

Meg szeretnénk azonban mutatni, miként következtethetünk közvetlenül a 2. § eredményeiből  $D$  akárhányszori differenciálhatóságára anélkül, hogy e tényre hivatkoznánk.

Legyenek  $A$  és  $A_1, A_2, \dots$  a  $\mathfrak{G}$  csoport mátrixai és legyen  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  egy  $0$ -hoz tartó pozitív számsorozat. Az

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - A) \rightarrow U$$

összefüggésből ekkor következik:

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (A_p A^{-1} - E) = \frac{1}{\varepsilon_p} (A_p - A) \cdot A^{-1} \rightarrow U A^{-1},$$

úgyhogy  $U A^{-1}$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez; továbbá:

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (D(A_p A^{-1}) - E_*) \rightarrow J(U A^{-1}),$$

$$\frac{1}{\varepsilon_p} (D(A_p) - D(A)) = \frac{1}{\varepsilon_p} (D(A_p A^{-1}) - E_*) \cdot D(A) \rightarrow J(U A^{-1}) D(A).$$



Ez azonban azt jelenti, hogy  $D$  differenciálható az  $A$  helyen és az  $U$  irányban és hogy differenciálhányadosa  $J(UA^{-1})D(A)$ .

Ha egyszer felismertük, hogy a  $D$  ábrázolás  $v$ -ször differenciálható, úgy eképpen következtethetünk tovább:  $J(UA^{-1})$  lineáris  $UA^{-1}$ -ben, tehát akárhányszor differenciálható; minthogy azonban ez  $D(A)$  differenciálhányadosa, az maga  $v+1$ -szer differenciálható

#### 4. §

Zárjuk le most szisztematikusan megfontolásainkat.

Tartozzék  $A$  a  $\mathfrak{G}$  csoporthoz, s tartozzék  $E$ -nek azon környezetéhez, amelyben ebből következik, hogy  $\ln A$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez (vö. I. tétel).

Ekkor létezik egy olyan  $\mathfrak{G}$ -hoz tartozó  $A_1, A_2, \dots$  sorozat, hogy

$$p(A_p - E) \rightarrow \ln A \quad \left( \text{tehát } \varepsilon_p = \frac{1}{p} \right),$$

$$p \ln A_p \rightarrow \ln A.$$

Következésképpen

$$p(D(A_p) - E_*) \rightarrow J(\ln A),$$

$$p \ln_* D(A_p) \rightarrow J(\ln A).$$

Innen következik:

$$\exp(p \ln A_p) \rightarrow \exp(\ln A), \quad A_p^p \rightarrow A,$$

$$\exp_*(p \ln_* D(A_p)) \rightarrow \exp_*(J(\ln A)), \quad D(A_p)^p = D(A_p^p) \rightarrow \exp_*(J(\ln A)).$$

Minthogy  $D$  folytonos az  $A$  helyen, fennáll tehát:

$$D(A) = \exp_*(J(\ln A)).$$

Legyen  $A_0$  a  $\mathfrak{G}$  csoport valamely eleme, és  $\mathfrak{U}$  az  $A_0$  elem azon környezete, amely az

$$X' = A_0 X$$

leképezéskor  $E$  fentemlített környezetéből előáll. Ekkor  $\ln(A_0^{-1}A)$  értelmezve van és hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez, s fennáll:

$$D(A) = D(A_0)D(A_0^{-1}A) = D(A_0)\exp_*(J(\ln(A_0^{-1}A))).$$

Most könnyű igazolni a hatványsorba fejtés lehetőségét; a

$$D(X) = D(A_0) \cdot \exp_*(J(\ln(A_0^{-1}X)))$$

függvény ugyanis a következő függvényekből épül fel:

$$X' = A_0^{-1}X, \quad X'' = \ln X', \quad X''' = J(X''),$$

$$X^{IV} = \exp_* X''', \quad X^V = D(A_0) \cdot X^{IV}.$$

Ezen függvények közül az első, a harmadik és az ötödik lineáris. A másodiknak



pedig van hatványsora, mely a megengedett ( $\mathfrak{U}$ -beli)  $X$ -ekre konvergál; ezekre ugyanis  $\ln(A_0^{-1}X)$  értelmezve van, azaz

$$|X' - E| = |A_0^{-1}X - E| < 1.$$

Ezzel igazoltuk, hogy  $D(X)$ -nek  $\mathfrak{U}$ -ban konvergens hatványsora van.

Vegyük tekintetbe, hogy innen nem következik az analiticitás a szó megszokott értelmében (vö. <sup>1</sup> lábjegyzet), mivel a valós rész és a képzetes rész külön kezelendő. Mindenesetre öt függvényünk közül a két első és a két utolsó kielégíti a Cauchy—Riemann-féle differenciálegyenletet, a harmadik függvény,  $J$  esetében azonban nem feltétlenül ez a helyzet.

Foglaljuk össze az ábrázolásokra vonatkozó eredményeinket:

II. tétel. Ha  $D$  ábrázolása  $\mathfrak{G}$ -nek, és ingadozása  $E$  környezetében  $< 1$  (ez bizonyosan így van, ha az ábrázolás nem mindenütt diszkontinuus  $\mathfrak{G}$ -ben), úgy  $\mathfrak{G}$ -ben mindenütt folytonos és  $\mathfrak{G}$ -ra egyértelműen és folytonosan kiterjeszthető.

A kiterjesztés ábrázolása  $\mathfrak{G}$ -nak, mely  $\mathfrak{G}$ -on mindenütt folytonos,  $\mathfrak{G}$  minden korlátos és zárt részhalmazán eleget tesz a Lipschitz-feltételnek és  $\mathfrak{G}$ -ban mindenütt akárhányszor differenciálható. Az ábrázolás azonkívül  $\mathfrak{G}$  bármely  $A_0$  pontjának környezetében az argumentum elemei valós és képzetes részének függvényeként konvergens hatványsorba fejthető.

## Függelék

### 1. §

Szeretnénk itt bemutatni a dolgozat folyamán említett ellenpéldákat, melyek a szöveg folyamatosságát zavaróan szakították volna meg. Ezek a következők:

a) Egy diszkontinuus ábrázolás, melynek ingadozása 2. ( $\mathfrak{G} = \mathfrak{G}$ , tetszőleges  $m$ -re és  $n$ -re.) Vö. Bev. 1. §, IV. 1. §.

b)  $\mathfrak{G}$  (diszkontinuus) ábrázolása, mely nem bővíthető ki  $\mathfrak{G}$  ábrázolásává ( $m=3$ ,  $n=1$ ). Vö. IV. 4. §.

c) Egy  $\mathfrak{G} = \mathfrak{G} = \mathfrak{G}(E)$  csoport, melyet  $\exp U$  (ahol  $U$  eleme  $J$ -nek) nem meríti ki (tetszőleges, egynél nagyobb  $m$ -re). Vö. III. 5. §.

d) Egy  $\mathfrak{I}$  lineáris sokaság, mely  $U$ -val és  $V$ -vel együtt tartalmazza azok  $UV - VU$  kommutátorát és ennek ellenére nem infinitezimális csoportja valamely  $\mathfrak{G}$  csoportnak (egynél nagyobb  $m$ -re). Vö. Bev. 1. §, II. 4. §.

Ellenpéldáink a következők:

a) Az

$$\begin{pmatrix} e^{2\pi\alpha i} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (\alpha \text{ valós szám})$$

$p$ -dimenziós mátrixot jelölje  $E_p(\alpha)$ . Legyen  $\mathfrak{G}$  valamennyi  $E_m(\alpha)$  halmaza ( $\alpha$  valós); ekkor  $\mathfrak{G}$  nyilvánvalóan csoport, és  $\mathfrak{G} = \mathfrak{G} = \mathfrak{G}(E)$ . Defináljuk  $D(A)$ -t a  $\mathfrak{G}$  csoporton



a következőképpen: Ha  $A = E_m(\alpha)$ , úgy legyen  $D(A) = E_n(\varphi(\alpha))$ . Ez mindenesetre (egyértékű) ábrázolása  $\mathfrak{G}$ -nek, ha

$$\varphi(1) = 0, \quad \varphi(\alpha + \beta) = \varphi(\alpha) + \varphi(\beta).$$

Válasszuk ki most a

$$\psi(\alpha + \beta) = \psi(\alpha) + \psi(\beta)$$

függvényegyenlet egy Hamel-féle diszkontinuus megoldását (vö. <sup>2</sup> lábjegyzet); legyen

$$\varphi(\alpha) = \psi(\alpha) - \alpha\psi(1).$$

Ekkor  $\varphi$  eleget tesz követelményeinknek,  $D$  tehát ábrázolás.

Továbbá  $\varphi(\alpha)$  is diszkontinuus és ugyancsak megoldása a fenti függvényegyenletnek; Hamel szerint tehát (lásd az idézett helyen) az  $\alpha$ ,  $\varphi(\alpha)$  pontok a síkban mindenütt sűrűn fekszenek.

Speciálisan találhatók ilyen pontok  $0, 0$  és  $0, \frac{1}{2}$  tetszőleges közelségében; a megfelelő  $A$  és  $D(A)$  mátrixok tehát tetszőlegesen közel fekszenek az  $E_m(0) = E$ ,  $E_n(0) = E_*$ , ill.  $E_m(0) = E$ ,  $E_n(\frac{1}{2})$  mátrixokhoz. Minthogy

$$\left| E_n\left(\frac{1}{2}\right) - E_* \right| = |e^{\pi i} - 1| = 2,$$

$D$  ingadozása az  $E$  helyen legalább 2. Az ingadozás azonban pontosan 2-vel egyenlő, minthogy mindenkor fennáll:

$$|E_n(\alpha) - E_n(\beta)| = |e^{2\pi i \alpha} - e^{2\pi i \beta}| \leq 2.$$

Minthogy az ingadozás  $\neq 0$ ,  $D$  természetesen diszkontinuus.

b) Hausdorff megmutatta:<sup>13</sup> Ha a háromdimenziós térben adott két, a kezdőponton áthaladó tengely, melyek egymással transzcendens koszinuszú szöget zárnak be, és ha  $S$  a  $180^\circ$ -os elforgatást jelöli az egyik,  $T$  pedig a  $120^\circ$ -os elforgatást a másik tengely körül, úgy az

$$\begin{aligned} ST^{u_1} ST^{u_2} \dots ST^{u_v} S &= E, \\ ST^{u_1} ST^{u_2} \dots ST^{u_v} &= E, \\ T^{u_1} ST^{u_2} \dots ST^{u_v} S &= E, \\ T^{u_1} ST^{u_2} \dots ST^{u_v} &= E \end{aligned} \quad (u_1, u_2, \dots, u_v = 1, 2)$$

alakú egyenletek közül nem teljesülhet egy sem.

Legyen

$$A = TST, \quad B = STSTS;$$

ezek ugyancsak elforgatások, mégpedig ugyanazzal a szöggel, minthogy

$$B = S^{-1}AS.$$

Ez a szög inkommenzurábilis  $\pi$ -vel, minthogy egyébként

$$A^v = E, \quad (TST)^v = E, \quad TST^2 ST^2 \dots T^2 ST = E$$

<sup>13</sup> Hausdorff, Grundzüge der Mengenlehre, Berlin—Leipzig 1914 (1. kiadás).



volna. Könnyen beláthatjuk továbbá, hogy egyáltalán semmilyen

$$A^{u_1} B^{v_1} A^{u_2} B^{v_2} \dots A^{u_v} B^{v_v} = E$$

(itt  $u_1$  és  $v_v$  kivételével valamennyi  $u_\mu, v_\mu \neq 0$ ; amennyiben  $u_1 = v_v = 0$ , úgy  $v > 1$ ) alakú egyenlet nem állhat fenn.

Nevezzük valamennyi  $A^{u_1} B^{v_1} \dots A^{u_v} B^{v_v}$  halmazát  $\mathfrak{G}$ -nek; ez csoport. Mint-hogy  $\mathfrak{G}$  csupa elforgatást tartalmaz (a kezdőponton áthaladó tengelyek körül), ugyanez  $\overline{\mathfrak{G}}$ -ra is áll; megmutatjuk, hogy  $\overline{\mathfrak{G}}$  mindezen forgásokat tartalmazza. Mint-hogy  $\mathfrak{G}$  a  $\pi$ -vel inkommensurábilis szögű elforgatásokat tartalmazza  $A$  és  $B$  tengelye körül,  $\overline{\mathfrak{G}}$ -nak tartalmaznia kell valamennyi elforgatást ezen két tengely körül. Minthogy azonban ezek a tengelyek különbözők (az ellenkező esetben ugyanis a forgási szögek egyenlősége folytán  $A=B$  vagy  $A=B^{-1}$  volna), minden elforgatás összehetető ilyen elforgatásokból; innen következik az állítás.

Mármost  $\mathfrak{G}$  minden eleme egyetlen-egyféleképpen hozható az

$$X = A^{u_1} B^{v_1} \dots A^{u_v} B^{v_v} \quad (u_1 \text{ és } v_v \text{ kivételével valamennyi } u_\mu, v_\mu \neq 0)$$

alakra. Írható tehát:

$$D(X) = 2^{u_1+u_2+\dots+u_v}$$

( $D(X)$  szám, azaz egydimenziós mátrix). Minthogy nyilvánvalóan

$$D(E) = 1, \quad D(XY) = D(X)D(Y),$$

$D$  ábrázolása  $\mathfrak{G}$ -nek.

Fennáll:

$$D(A) = 2, \quad D(B) = 1, \quad \text{azaz} \quad D(A) \neq D(B).$$

Minthogy  $A$  és  $B$  konjugáltak  $\overline{\mathfrak{G}}$ -ban (mivel  $S$  hozzátartozik  $\overline{\mathfrak{G}}$ -hoz),  $\overline{\mathfrak{G}}$  minden ábrázolásának az  $A$  és a  $B$  helyen ugyanazt az értéket kell felvennie.

$D$  tehát nem terjeszthető ki  $\overline{\mathfrak{G}}$ -ra.

c) Az  $m=1$  esetben nem adható meg ilyen példa, minthogy ekkor a mátrixok valamennyien felcserélhetők; fennáll tehát:

$$\exp U_1 \cdot \exp U_2 \cdot \dots \cdot \exp U_j = \exp(U_1 + U_2 + \dots + U_j).$$

Megadunk egy példát  $m=2$ -re, mely a következőképpen vihető át valamennyi  $m > 2$ -re.

Mindegyik mátrixot a szegélyén  $m-2$  sorral és oszloppal egészítjük ki; az  $\mathfrak{I}$ -hez tartozó mátrixokhoz csupa zérust teszünk hozzá, a  $\mathfrak{G}$ -hez tartozó mátrixok pedig a főátlóban egyeseket, egyebütt zérusokat kapnak.

Legyen  $\mathfrak{G}$  az összes 1 determinánsú mátrix halmaza ( $m=2$ ). Könnyű belátni, hogy  $\mathfrak{G} = \overline{\mathfrak{G}} = \mathfrak{G}(E)$  és hogy  $\mathfrak{I}$  az összes zérus átlósösszegű mátrixot foglalja magában.

Az

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

mátrix hozzátartozik  $\mathfrak{G}$ -hez. Megmutatjuk, hogy az különbözik minden  $\exp U$ -tól, ahol  $U$  eleme  $\mathfrak{I}$ -nek.



Tudjuk, hogy  $U$  a következő alakú:

$$S^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} S \quad \text{vagy} \quad S^{-1} \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} S.$$

Az első esetben

$$\exp U = S^{-1} \exp \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} S = S^{-1} \begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2} \end{pmatrix} S.$$

Ez mindenesetre  $\neq A$ , minthogy  $A$  tudvalevőleg nem transzformálható átlós alakra. A második esetben mindenekelőtt megállapítjuk, hogy  $U$  átlósösszege  $2\lambda$ , így tehát  $\lambda$ -nak zérussal kell egyenlőnek lennie. Ekkor azonban

$$\exp U = S^{-1} \exp \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} S = S^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} S.$$

Ez is  $\neq A$ ; multiplikátorai ugyanis: 1, 1, míg  $A$  multiplikátorai:  $-1, -1$ .

d) A példát  $m=2$ -re adjuk meg;  $m>2$ -re ugyanolyan kiegészítésekkel vihető át, mint a c) esetben.

Legyen  $\tau$  valamely irracionális szám, és legyen

$$U = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & \tau i \end{pmatrix},$$

$\mathfrak{I}$  pedig legyen az összes  $\alpha \bar{U}$  halmaza ( $\alpha$  valós).  $\mathfrak{I}$  lineáris sokaság;  $\mathfrak{I}$  elemei mind felcserélhetők, úgyhogy kommutátoruk  $=0$ , ami  $\mathfrak{I}$ -hez tartozik.

Megmutatjuk, hogy  $\mathfrak{I}$  mindennek ellenére nem lehet valamely  $\mathfrak{G}$ -nek az infinitzimális csoportja.

Ha ugyanis az volna, úgy  $\mathfrak{G}$  tartalmazná valamennyi

$$\exp(\alpha \bar{U}) = \exp \begin{pmatrix} \alpha i & 0 \\ 0 & \tau \alpha i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\alpha i} & 0 \\ 0 & e^{\tau \alpha i} \end{pmatrix}$$

mátrixot. Minthogy  $\tau$  irracionális, Kronecker ismert tétele szerint minden  $\eta, \vartheta$  valós számpárhoz található olyan  $\alpha$ , hogy  $\alpha$  és  $\eta$ , valamint  $\tau \alpha$  és  $\vartheta$  mod (1) tetszőlegesen kicsit különböznek egymástól. Az

$$\begin{pmatrix} e^{\eta i} & 0 \\ 0 & e^{\vartheta i} \end{pmatrix} \quad (\eta, \vartheta \text{ valós})$$

mátrixok tehát torlódási pontjai  $\mathfrak{G}$ -nak és determinánsuk zérustól különböző, úgyhogy hozzá kell tartozniok  $\mathfrak{G}$ -hoz. Minthogy  $\mathfrak{I}$  egyszersmind  $\mathfrak{G}$ -nak is infinitzimális csoportja, tartalmaznia kellene a

$$\lim_n \left[ \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{n} i} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - E \right] = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

mátrixot, ami nyilvánvalóan nem így van.



## 2. §

Valamely  $\mathfrak{I}$  infinitezimális csoportot, a folytonos csoportok elméletének megfelelő értelemben (azaz:  $\mathfrak{I}$  lineáris sokaság, mely az  $U, V$  mátrixokkal együtt azok  $UV - VU$  kommutátorát is tartalmazza) formális infinitezimális csoportnak nevezzük, az olyan  $\mathfrak{I}$ -t pedig amely infinitezimális csoportja valamely  $\mathfrak{G}$  csoportnak, valódi infinitezimális csoportnak nevezzük.

A d) példa megmutatta, hogy nem minden formális infinitezimális csoport valódi okvetlenül. Mindamellett a formális infinitezimális csoportokhoz is rendelhetők bizonyos csoporthoz hasonló képződmények; azt, hogy ez miképpen történhet, itt szeretnénk nagy vonalakban vázolni.

$\mathfrak{U}$  legyen  $E$ -nek valamely környezete.  $\mathfrak{U}$  valamely  $\mathfrak{G}^*$  részhalmazát csoportelemnek nevezzük ( $\mathfrak{U}$ -ban), ha a következő tulajdonságokkal rendelkezik.

a')  $E$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}^*$ -hoz.

b') Ha  $A$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}^*$ -hoz, úgy  $\det A \neq 0$  és  $A^{-1}$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}^*$ -hoz, hacsak  $\mathfrak{U}$ -hoz hozzátartozik.

c') Ha  $A, B$  hozzátartozik  $\mathfrak{G}^*$ -hoz, úgy  $AB$  is hozzátartozik  $\mathfrak{G}^*$ -hoz, hacsak  $\mathfrak{U}$ -hoz hozzátartozik.

Az ilyen csoportelemek esetében természetesen a II. 1. §-sal teljes analógiában definiálható az infinitezimális csoport, és csaknem valamennyi tételünk átvihető erre az esetre is.<sup>14</sup>

Megmutatható mármint, hogy minden  $\mathfrak{I}$  formális infinitezimális csoport egy-szersmind infinitezimális csoportja valamely alkalmasan választott csoportelem-nek;  $\mathfrak{U}$  ilyenkor mindig az

$$|X - E| < \frac{1}{2} \ln 2$$

egyenlőtlenséget teljesítő  $X$ -ek halmazának választható. A csoportelem egyébként azonos önmaga burkoló halmazával; és pedig azon  $\exp U$  mátrixok halmazával egyenlő (itt  $U$  hozzátartozik  $\mathfrak{I}$ -hez), amelyek  $\mathfrak{U}$ -ban fekszenek.

<sup>14</sup> Ez a fogalomalkotás szoros rokonságot mutat egy  $O.$  Schreiertől vizsgált fogalommal. Vö. Hamb. Abh. 4 (1926), 15—32 és 233—244. old.







## *Az International Union of the Pure and Applied Physics (IUPAP) hírei*

Az 1969 szeptemberében Dubrovnikban tartott XIII. Közgyűlés a nemzetközi konferenciákkal kapcsolatban a következő kritériumokat fogadta el:

1. Az Unió egy konferencia számára csak azután adhat támogatást, ha ennek minősége és szükségessége, nemzetközi jellege, szervezeti felépítése megfelelőnek bizonyult.
2. A vendéglátó ország biztosítja valamennyi, a rendezőbizottság által meghívott vendég számára a vízumot.
3. A konferenciák lehetnek

*A kategóriájúak:* nagy (500—2000) létszámú résztvevővel tartott olyan értekezletek, ahol az illető tudományterület valamennyi v. legalábbis legtöbb kérdése vizsgálat alá kerül. A szakbizottságok többsége csupán 3 évenként hív össze ilyen konferenciát.

*B kategóriájúak:* közepes (100—500) létszámú résztvevővel tartott olyan összejövetelek, amelyeken a szakbizottságok területéhez tartozó valamelyik problémakört részletekben megvizsgálják. Egy-egy szakbizottság évenként támogat egy-egy ilyen konferenciát.

*C kategóriájúak:* kis (40—100) fős összejövetelek, amelyeken gyakran csak külön meghívással lehet résztvenni, és amelyen egy nagyon szűk területen történt haladást vitatnak meg. Az ilyen összejöveteleket célszerű az A kategóriájúakhoz csatolva közvetlenül előttük v. utánuk megrendezni.

Az Unió hangoztatja a kutatás és az oktatás szoros kapcsolatának elvét. Bátorítja a tanárokat annak hangsúlyozásával, hogy ők is kutatók, ill. a kutatók személyes közreműködését kívánja az alsófokú oktatásban.

Az Unió hangsúlyozza, hogy a jövőben nagyobb elismeréssel kell elbírálni azoknak a munkáját, akik áttekintik, összegezik és kivonatolják a mások munkáját annak érdekében, hogy ezeket könnyen hozzáférhetővé tegyék a fizikusok közössége számára.



MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Helle Mária

A kézirat beérkezett: 1970. V. 13. — Példányszám: 600 — Terjedelem: 9,45 (A/5) ív

70-2556 — Szegedi Nyomda



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
Budapest I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181 útján eszközölhetők.)



Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26,491
---------------

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Vasvári Béla</i> : A kalcium, stroncium és bárium fémek elektronszerkezete III. ....	397
<i>C. A. Coulson</i> : Nem-valencia-kölcsönhatások .....	423

## KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>Neumann János</i> : Lineáris transzformációk csoportjainak és ábrázolásaiknak analitikus tulajdonságairól .....	463
--	-----

## FOLYÓIRATISMERTETÉS

Thin Solid Films; Thin Films ( <i>Barna B. Péter</i> ) .....	462
--	-----

## A IUPAP HÍREI

A XIII. közgyűlésen elfogadott határozatok .....	503
--	-----



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

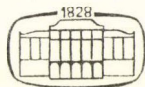
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XVIII. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1970



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó Budapest V., Alkotmány utca 21., pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43 790 057 181 útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# IZOTRÓP ANYAGOK MÁGNESES PERMEABILITÁSA ÉS OPTIKAI ÁLLANDÓI KÖZÖTTI ÖSSZEFÜGGÉSRŐL\*

HOFFMANN GYÖRGY, BAUER FERENC és FARKAS LÁSZLÓ

MOM Kutatási Főosztály, Budapest

Az erősen elnyelő anyagok (pl. fémek) optikai állandóit, az  $n$  törésmutatót és  $k$  elnyelési együtthatót gyakran a reflektált fény polarizációs jellemzőiből határozzák meg. A számításhoz használt formulák levezetésénél kihasználják azt a feltevést, hogy eléggé nagy (pl. optikai) frekvenciákon a  $\mu$  mágneses permeabilitás egységnyi. A dolgozatban olyan számítási eljárást írunk le, mely a  $\mu=1$  feltevés felhasználása nélkül megadja  $n$ -t és  $k$ -t. Evvel az eljárással kiszámítjuk néhány anyagra (Fe, Co, Ni, Pt, Na, Cu, Ag, Au-ra)  $n$  és  $k$  értékét, és összehasonlítjuk ezeket a korábban számított értékekkel.

Az előbbi  $n$  és  $k$ , valamint a visszavert fény polarizációs jellemzőinek ismeretében kiszámítjuk a  $\mu = \mu_1 - i\mu_2$  komplex mágneses permeabilitást néhány, az optikai spektrum tartományba eső hullámhosszra. A kapott permeabilitás értékek arra engednek következtetni, hogy az optikai rezgéstartományban is fellép mágneses hiszterézis miatti energia disszipáció.

Meghatározzuk a számított optikai állandókból és mágneses permeabilitásból a spektrális reflexiót, és összehasonlítjuk azt a reflexió mért értékével.

Számítási eljárást írunk le, mellyel az optikai állandók és  $\mu$  ismeretében meg lehet határozni az  $\varepsilon(\nu)$  dielektromos állandót és a  $\sigma(\nu)$  vezetőképességet ( $\nu$  a frekvencia).

## 1. Bevezetés

Az izotróp, erősen elnyelő anyagok optikai állandóit — az  $n$  törésmutatót és a  $k$  elnyelési együtthatót — a legpontosabban az anyag felületéről visszavert fény jellemzőiből lehet meghatározni. E mérési módszerek fontos csoportját képezik azok, melyek a visszavert fény polarizációs állapotából következtetnek  $n$  és  $k$  értékére. Összefoglaló néven ellipszometriás módszereknek nevezhetjük ezeket az eljárásokat, melyek lényege a következőképpen foglalható össze.

A mérendő minta felületére lineárisan poláros monokromatikus fényt ejtünk. A visszavert fény általában elliptikusan poláros lesz. Megmérjük az ehhez tartozó polarizációs ellipszis adatait, majd ezek felhasználásával a Fresnel-formulákból levezetett összefüggésekből kiszámítjuk az optikai állandókat.

Ha a fenti eljárást részletesen megvizsgáljuk, akkor kitűnik, hogy az optikai állandókat megadó formulák levezetése során felhasználjuk azt a feltevést, hogy a  $\mu(\nu)$  mágneses permeabilitás ( $\nu$  a frekvencia) az optikai spektrum tartományban közel egységnyi:  $\mu(\nu) \approx 1$ . [1]

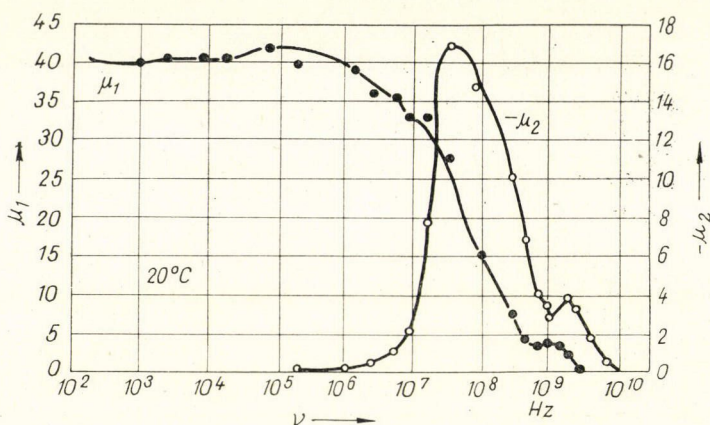
A  $\mu(\nu) \approx 1$  közelítés kísérleti megalapozásával kapcsolatban megemlítjük *Hagen* és *Rubens*, valamint *V. K. Arkagyev* méréseit. *Hagen* és *Rubens* [2] az infravörös

\* Érkezett 1969. nov. 23.



hullámok ferromágneses fémekről való reflexióját vizsgálva azt találta, hogy a mágneses permeabilitás a spektrumnak ebben a tartományában gyakorlatilag egységnyi. V. K. Arkagyev [3] a centiméteres és deciméteres hosszúságú elektromágneses hullámok terjedésére, ill. ferromágneses huzalokról való visszaverődésére vonatkozó vizsgálatait során azt tapasztalta, hogy vas esetén  $\mu(\nu) \approx 1$ , ha  $\lambda \approx 1$  cm, és nikkelt esetén pedig  $\mu(\nu) \approx 1$ , ha  $\lambda \approx 3$  cm.

A  $\mu(\nu) \approx 1$  feltevés jogossága mellett szólnak azok a spektrumok is, melyek a mágneses permeabilitás frekvencia függését mutatják a kb.  $10^6 - 10^{10}$  Hz frekvencia tartományban ([4], [5], [6]). Az 1. ábrán egy ilyen mágneses spektrumot látunk,



1. ábra. Polikristályos nikkelt-ferroxide mágneses spektruma [5]

mely a komplex mágneses permeabilitás valós, ill. képzetes részét ( $\mu_1$ -t és  $\mu_2$ -t) tünteti fel a frekvencia függvényében. (L. a 6. szakaszt.)

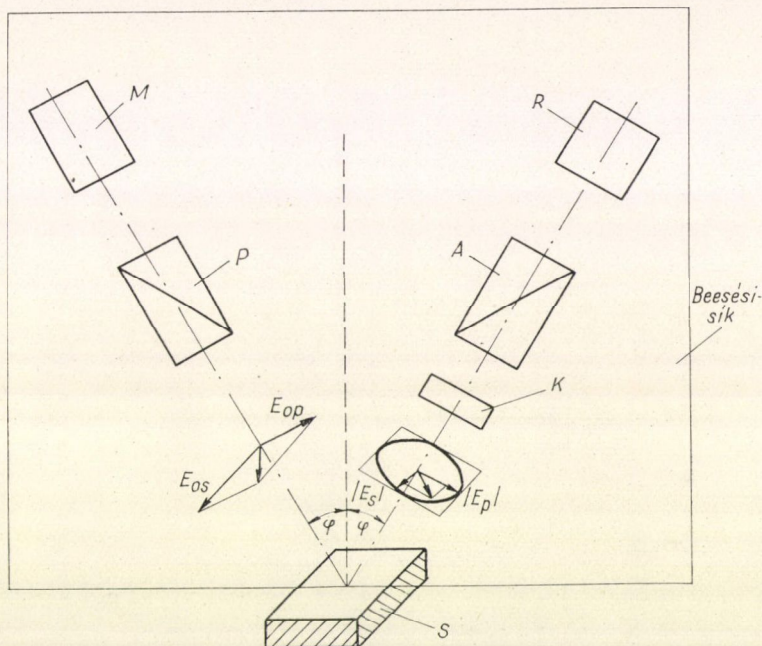
A  $\mu \approx 1$  reláció széles körű alkalmazásának azonban van egy hátránya. A mágneses permeabilitás hatásáról nem kapunk információt a kb.  $10^{10} - 10^{15}$  Hz, széles frekvencia tartományban. Mivel a mágneses permeabilitás sok anyagnál közismerten erősen frekvenciafüggő, azért úgy véljük, hogy eléggé önkényes a  $\mu(\nu) \approx 1$ , ha  $\nu > 10^{10}$  Hz feltevését minden anyagra általánosítani. Ezért célszerű arra törekedni, hogy  $n$  és  $k$  értékét az ellipszometriásan mért adatokból a  $\mu(\nu) = 1$  feltevés kihasználása nélkül határozzuk meg. A következőkben látni fogjuk, hogy ez lehetséges [7]. Ezenkívül mód van arra is, hogy a mágneses permeabilitást ellipszometriásan mért adatokból kiszámítsuk.

Ismerve  $n$ ,  $k$  és  $\mu(\nu)$  értékét kiszámíthatjuk az  $R(\nu)$  reflexiót. Ha a reflexió számított és mért értékét összehasonlítjuk, képet kaphatunk arról, hogy a mágneses permeabilitás 1-től való eltérése milyen mértékben érezteti hatását az optikai spektrum tartományban.



## 2. Összefüggések az optikai konstansok és az ellipszometriásan mérhető adatok között

A 2. ábra egy ellipszométer sematikus vázlatát és a geometriai viszonyokat mutatja. Az  $M$  monokromátorból kilépő fénynyaláb áthalad a  $P$  polarizátoron és így az  $S$  minta felületére  $\varphi$  szög alatt lineárisan poláros fény esik. A visszavert elliptikusan poláros fény áthalad a  $K$ — $A$  polarizációs elemen és az  $R$  érzékelőre jut. Az elliptikusan poláros fény jellemzőit a  $K$ — $A$  berendezés méri, mely pl. egy kompenzátorból és egy analízatorból állhat.\*



2. ábra. Ellipszometriás mérőberendezés vázlata

Jelöljük a belső fényhez tartozó elektromos rezgés vektora amplitúdójának a beesési síkkal párhuzamos és arra merőleges összetevőit  $E_{op}$ -vel, ill.  $E_{os}$ -el; míg a visszavert fény esetén a megfelelő komponensek legyenek:  $|E_p|$ , ill.  $|E_s|$ .

A visszavert fény elektromos rezgése komplex amplitúdóit a következő formulák szolgáltatják [1]:

$$E_p = \frac{\sqrt{\epsilon' \mu - \sin^2 \varphi} - \epsilon' \cos \varphi}{\sqrt{\epsilon' \mu - \sin^2 \varphi} + \epsilon' \cos \varphi} E_{op} \quad (2.1)$$

$$E_s = \frac{\mu \cos \varphi - \sqrt{\epsilon' \mu - \sin^2 \varphi}}{\mu \cos \varphi + \sqrt{\epsilon' \mu - \sin^2 \varphi}} \cdot E_{os} \quad (2.2)$$

\* A 2. ábrán szereplő berendezés csak az elv illusztrálására szolgál; a korszerű mérési elrendezések ettől némileg különböznek (pl. [10]).



Itt  $\mu$  a mágneses permeabilitás és

$$\varepsilon' = \varepsilon - i \frac{2\sigma}{\nu} \quad (2.3)$$

A (2.3) alatti formulában  $\varepsilon$  a dielektromos állandót,  $\sigma$  a vezetőképességet  $\nu$  a frekvenciát jelöli.

Írjuk a (2.1) és (2.2) alatti komplex amplitúdókat az abszolút értékükkel és fázisukkal kifejezett alakba, hogy bevezethessük a méréssel meghatározható mennyiségeket:

$$E_p = |E_p| \exp i\delta_p \quad (2.4)$$

$$E_s = |E_s| \exp i\delta_s \quad (2.5)$$

összük el (2.4)-et (2.5)-el, kapjuk

$$\frac{E_p}{E_s} = \operatorname{tg} \varrho \cdot \exp [-i\Delta] \quad (2.6)$$

ahol

$$\operatorname{tg} \varrho = \frac{|E_p|}{|E_s|} \quad (2.7)$$

$$\Delta = \delta_s - \delta_p \quad (2.8)$$

Kísérletileg könnyen megvalósítható, hogy  $E_{op} = E_{os}$  legyen; a továbbiakban feltezzük ezen egyenlőség fennállását.

A [7] dolgozatban megmutattuk, hogy (2.1)-ből és (2.2)-ből levezethető a következő összefüggés:

$$\frac{K}{\sin \varphi \cdot \operatorname{tg} \varphi} = L \cdot \frac{\cos 2\varrho - i \cdot \sin 2\varrho \cdot \sin \Delta}{1 - \sin 2\varrho \cdot \cos \Delta} \quad (2.9)$$

ahol

$$K = \sqrt{\varepsilon' \mu - \sin^2 \varphi} \quad (2.10)$$

és

$$L = \frac{\varepsilon' \mu - 1}{\varepsilon' - \mu} \quad (2.11)$$

Egyszerű átalakítás után (2.9)-ből az alábbi összefüggésre jutunk:

$$K^2 = L^2 (M - i \cdot N) \quad (2.12)$$

itt

$$M = \sin^2 \varphi \cdot \operatorname{tg}^2 \varphi \cdot \frac{\cos^2 2\varrho - \sin^2 2\varrho \cdot \sin^2 \Delta}{(1 - \sin 2\varrho \cdot \cos \Delta)^2} \quad (2.13)$$

$$N = \sin^2 \varphi \cdot \operatorname{tg}^2 \varphi \cdot \frac{\sin 4\varrho \cdot \sin \Delta}{(1 - \sin 2\varrho \cdot \cos \Delta)^2} \quad (2.14)$$

A (2.12)–(2.14) formulák kapcsolatot teremtenek  $n$ ,  $k$  és az ellipszometriásan mérhető adatok ( $\varphi$ ,  $\varrho$  és  $\Delta$ ) között. E ponton hangsúlyoznunk kell azt a körülményt, hogy a levezetés során mindeddig nem használtuk ki a  $\mu(\nu) = 1$  feltevést. Vizsgáljuk meg milyen formulák szolgáltatják az optikai konstansokat, ha figyelembe vesszük, illetve elejtjük az előbbi feltételt.



### 3. Az optikai állandók meghatározása, ha $\mu=1$

A (2.11) formulából látszik, hogy ha  $\mu=1$ , akkor  $L=1$ . Ez esetben (2.12)—(2.14)-ből  $n$ -re és  $k$ -ra a szokásos formulákat kapjuk:

$$n = \frac{\sqrt{I_1 + \sqrt{I_1^2 + 4I_2^2}}}{\sqrt{2}} \quad (3.1)$$

$$k = \frac{I_2}{n} = \frac{I_2 \cdot \sqrt{2}}{\sqrt{I_1 + \sqrt{I_1^2 + 4I_2^2}}} \quad (3.2)$$

ahol

$$I_1 = \sin^2 \varphi + M = n^2 - k^2 \quad (3.3)$$

$$I_2 = \frac{N}{2} = n \cdot k \quad (3.4)$$

Az  $I_1$  és  $I_2$  mennyiségek a mért  $\varphi$ ,  $\varrho$  és  $\Delta$  ismeretében a (2.13), (2.14) formulák felhasználásával kiszámíthatók,  $I_1$ -t és  $I_2$ -t (3.1)-be és (3.2)-be írva nyerjük  $n$ -t és  $k$ -t.

A (2.13), (2.14) formulák némileg egyszerűsödnek, ha  $\Delta = \pi/2$ . Az ehhez tartozó beesési szöget, ill. azimutot, fő beesési szögnek, ill. fő azimutnak nevezik, jelöljük ezen szögeértékeket  $\Phi$ -vel, ill.  $\varrho_f$ -el.

A számítások egyszerűsítése céljából a (3.1)—(3.4); (2.13), (2.14) formulák helyett gyakran egyszerűbb közelítő formulákat alkalmaznak. Megemlíttjük, hogy ha  $|n^2 - k^2| \gg \sin^2 \varphi$ , akkor érvényesek a következő közelítések:

$$n = \sin \varphi \cdot \operatorname{tg} \varphi \cdot \frac{\cos 2\varrho}{1 - \sin 2\varrho \cdot \cos \Delta} \quad (3.5)$$

$$k = \sin \varphi \cdot \operatorname{tg} \varphi \cdot \frac{\sin 2\varrho \cdot \sin \Delta}{1 - \sin 2\varrho \cdot \cos \Delta} \quad (3.6)$$

Ha  $\Delta = \pi/2$ ,  $\varphi = \Phi$ ,  $\varrho = \varrho_f$ , akkor (3.5)-ből és (3.6)-ból egyszerű átalakítással következik, hogy

$$\kappa = \frac{k}{n} = \operatorname{tg} 2\varrho_f \quad (3.7)$$

$$n = \frac{\sin \Phi \cdot \operatorname{tg} \Phi}{\sqrt{1 + \kappa^2}} \quad (3.8)$$

Az irodalomban szereplő  $n$  és  $k$  értékeket gyakran a (3.7), (3.8) formulák segítségével számítják ki (l. pl. [8]). Tehát  $n$  és  $k$  értékeiben a  $\mu=1$  közelítés hatása mellett sok esetben még más közelítések hatása is érvényre juthat. Abból a célból, hogy az utóbbi közelítések által okozott hibákat  $n$  és  $k$  értékéből leválasszuk, a a vizsgált anyagokra a (3.1)—(3.4), (2.13), (2.14) alatti pontos formulák segítségével öt tizedesjegy pontosan kiszámítottuk  $n$ -t és  $k$ -t, majd ezeket az értékeket három tizedesjegyre kerekítettük. A számításhoz szükséges  $\Phi$ ,  $\varrho_f$  értékek a [8], [9] dolgozatokból és [25]-ből származnak.

A következő szakaszban látni fogjuk, hogy  $n$  és  $k$  számításához  $\mu \neq 1$  esetén szükséges a fő beesési szögtől eltérő  $\varphi$  értékhez tartozó  $\varrho$ , ill.  $\Delta$  is. Azonban ezeket



## 1. TÁBLÁZAT

Az  $n$ ,  $k$  optikai állandók (3.1)–(3.4), (2.13), (2.14)-ből számított értékeinek és  $n$ ,  $k$  irodalmi értékek összehasonlítása

$$\varphi = \Phi, \quad q = q_f, \quad \Delta = 90^\circ, \quad \mu = 1$$

Anyag	$\lambda$ [nm]	$\Phi$	$\varrho_f$	Számított érték		Irodalmi érték		Irodalom	
				$n$ (3.1)-ből	$k$ (3.2)-ből	$n$	$k$		
Fe Co	589	76,5°	27,65°	2,374	3,234	2,36	3,20	Drude [9]	
	231	64,517	29,65	1,089	1,445	1,10	1,43	Ingersol [8]	
	275	70,367	29,983	1,411	2,140	1,41	2,14	Ingersol [8]	
	347	72,300	30,333	1,541	2,470	1,54	2,47	Ingersol [8]	
	395	74,250	31,333	1,632	2,910	1,63	2,91	Ingersol [8]	
	440	75,300	31,750	1,704	3,185	1,70	3,19	Ingersol [8]	
	450	76,300	31,867	1,818	3,467	1,79	3,42	Ingersol [8]	
	500	77,083	31,883	1,929	3,711	1,93	3,72	Ingersol [8]	
	550	77,667	31,717	2,047	3,900	2,05	3,90	Ingersol [8]	
	560	77,500	31,200	2,092	3,806	2,19	3,81	Ingersol [8]	
Ni	420	72,333	31,700	1,411	2,538	1,41	2,53	Ingersol [8]	
	436	75,383	31,050	1,797	3,167	1,74	3,28	Ingersol [8]	
	492	75,667	31,333	1,800	3,258	1,74	3,37	Ingersol [8]	
	500	74,333	22,250	1,546	2,313	1,54	2,97	Ingersol [8]	
	578	76,000	31,667	1,803	3,369	1,75	3,48	Ingersol [8]	
	589	76,167	31,683	1,823	3,417	1,79	3,33	Ingersol [8]	
	615	76,800	31,817	1,896	3,616	1,85	3,73	Ingersol [8]	
	650	77,583	32,583	1,909	3,927	1,91	3,93	Ingersol [8]	
	Pt	589	78,500	32,583	2,066	4,280	2,06	4,26	Drude [9]
	Na	589	68,850	44,483	0,047	2,223	0,044	2,42	Hodgman [25]
Cu	589	71,567	39,083	0,619	2,627	0,62	2,63	Ingersol [8]	
Ag	589	75,700	43,583	0,181	3,672	0,170	3,62	Drude [9]	
Au	589	72,300	41,650	0,367	2,810	0,37	2,82	Drude [9]	

a polarizációs adatokat az irodalomban csak ritkán közlik. *P. Drude* [9] cikke tartalmaz néhány ilyen adatot, a számítások egy részéhez ezeket használtuk. A többi  $\varphi$ -t,  $q$ -t és  $\Delta$ -t *Prisivalko* [10] könyvében levő táblázatokból interpoláltuk. Ellenőrzésképpen ezekhez a  $\varphi$ ,  $q$  és  $\Delta$  értékekhez tartozó  $n$ -t és  $k$ -t is kiszámítottuk. A fenti számítások eredményét az 1. és 2. táblázat tartalmazza.

#### 4. Az optikai állandók meghatározása, ha a mágneses permeabilitás nem egységnyi

A (2.11) formulából látszik, hogy ha  $\mu \neq 1$ , akkor  $L \neq 1$ , ezért (2.12)-ből nem következik (3.3) és (3.4). Tehát ez esetben a 3. pontban vázolt számítási eljárás nem alkalmazható.

A [7] dolgozatban azonban kimutattuk, hogy az előbbi nehézség áthidalható, ha két különböző beesési szögnél határozzuk meg a visszavert fényhez tartozó polarizációs ellipszis jellemzőit.

Legyenek ugyanis az említett ellipszis adatai  $\varphi_1$  beesési szögnél  $q_1$  és  $\Delta_1$ ;  $\varphi_2$  beesési szögnél pedig  $q_2$  és  $\Delta_2$ . Ezekhez (2.13) és (2.14) szerint meghatározhatjuk a megfelelő  $M$  és  $N$  értékeket. Tartozzon az első méréshez  $M_1$ ,  $N_1$ ; a másodikhoz



## 2. TÁBLÁZAT

Az  $n$ ,  $k$  optikai állandók meghatározása (3.1)–(3.4), (2.13), (2.14)-ből a  $\varphi$ ,  $q$ ,  $\Delta$  polarizációs jellemzők ismeretében, ha  $\Delta \neq 90^\circ$  és  $\mu = 1$

Anyag	$\lambda$ [nm]	$\varphi$	$q$	$\Delta$	Számított érték		Irodalom
					$n$ (3.1)-ből	$k$ (3.4)-ből	
Fe	589	50,00°	37,627°	21,429°	2,372	3,172	Prisiwalko [10]*
Co	231	50,00	32,177	43,602	1,227	1,515	Prisiwalko [10]*
	275	50,00	35,449	34,417	1,417	2,115	Prisiwalko [10]*
	347	50,00	36,394	30,728	1,564	2,405	Prisiwalko [10]*
	395	50,00	38,069	27,256	1,640	2,888	Prisiwalko [10]*
	440	50,00	38,743	25,439	1,709	3,161	Prisiwalko [10]*
	450	50,00	39,75	23,955	1,811	3,367	Prisiwalko [10]*
	500	50,00	39,535	22,093	1,951	3,674	Prisiwalko [10]*
Ni	550	50,00	39,786	20,936	2,060	3,880	Prisiwalko [10]*
	560	50,00	39,498	21,056	2,109	3,777	Prisiwalko [10]*
	420	50,00	37,069	31,536	1,435	2,461	Prisiwalko [10]*
	436	50,00	38,803	24,815	1,764	3,222	Prisiwalko [10]*
	492	50,00	39,076	24,431	1,756	3,323	Prisiwalko [10]*
	500	50,00	38,569	27,485	1,543	2,962	Prisiwalko [10]*
	578	50,00	39,311	23,902	1,770	3,428	Prisiwalko [10]*
	589	50,00	38,870	24,322	1,807	3,286	Prisiwalko [10]*
	615	50,00	39,714	22,414	1,867	3,687	Prisiwalko [10]*
	650	50,00	40,081	21,394	1,918	3,912	Prisiwalko [10]*
Pt	589	76,00	32,767	76,600	2,085	4,278	Drude [9]
Na	589	65,00	44,95	70,250	0,005	2,610	Drude [24]
Cu	589	70,00	38,833	84,133	0,649	2,633	Drude [9]
Ag	589	70,00	43,95	68,800	0,153	3,647	Drude [9]
Au	589	68,00	41,717	75,267	0,370	2,803	Drude [9]

\* interpolált

$M_2$ ,  $N_2$  értékpár. Ekkor a törésmutatót és az elnyelési együtthatót (3.1)-el és (3.2)-vel formailag megegyező kifejezés szolgáltatja:

$$n = \frac{\sqrt{I_1 + \sqrt{I_1^2 + 4I_2^2}}}{\sqrt{2}} \quad (4.1)$$

$$k = \frac{I_2}{n} \quad (4.2)$$

Most azonban  $I_1$  és  $I_2$  kifejezése lényegesen eltér (2.13)-tól és (2.14)-től:

$$I_1 = A. \quad (4.3)$$

$$I_2 = \frac{B}{2} \quad (4.4)$$

ahol

$$A = \frac{(\sin^2 \varphi_1 - a \cdot \sin^2 \varphi_2)(1 - a) + b^2 \cdot \sin^2 \varphi_2}{(1 - a)^2 + b^2} \quad (4.5)$$

$$B = - \frac{b(\sin^2 \varphi_1 - a \cdot \sin^2 \varphi_2) + (a - 1) \cdot b \cdot \sin^2 \varphi_2}{(1 - a)^2 + b^2} \quad (4.6)$$



és

$$a = \frac{M_1 \cdot M_2 + N_1 \cdot N_2}{M_2^2 + N_2^2} \quad (4.7)$$

$$b = \frac{M_1 \cdot N_2 - M_2 \cdot N_1}{M_2^2 + N_2^2} \quad (4.8)$$

A számítás kissé egyszerűsödik, ha pl.  $\varphi_2$  egyenlő a fő beesési szöggel. Ekkor tehát  $\varphi_2 = \Phi$ ,  $q_2 = q_f$ ,  $\Delta = \frac{\pi}{2}$ .

Az 1., ill. 2. táblázat  $\varphi_1$ ,  $q_1$ ,  $\Delta_1$  és  $\varphi_2$ ,  $q_2$ ,  $\Delta_2$  adatait a (4.1)–(4.8) formulákba írva kiszámítottuk,  $n$  és  $k$  értékét. A számítás eredményét a 3. táblázat tartalmazza.

### 3. TÁBLÁZAT

A (4.1)–(4.8) formulákból meghatározott optikai állandók;  $\mu \neq 1$ .

Anyag	$\lambda$ [nm]	$n$ (4.1)–(4.8)-ből számított	$k$ (4.2)–(4.8)-ből számított
Fe	589	0,9976	2,233
	231	1,370	0,650
	275	0,920	1,692
	347	0,765	1,469
	395	1,147	2,308
	440	1,124	2,551
	450	0,467	1,934
Co	500	1,290	2,468
	550	1,584	2,987
	560	1,483	2,695
	420	0,604	1,418
	436	–5,065	2,607
	492	–3,949	2,575
	500	0,863	0,079
	578	–5,138	2,829
	589	0,588	1,929
	615	–4,640	1,689
Ni	650	1,534	3,195
	589	1,409	0,810
	589	–0,821	0,331
	589	2,046	0,846
	589	–0,442	0,801
Pt	589	0,252	1,950
Au	589		

Az 1., 2. és 3. táblázatokban szereplő  $n$  és  $k$  értékeket összehasonlítva azonnal kitűnik, hogy a szokásos (3.1)–(3.4); (2.13), (2.14) formulák és a (4.1)–(4.8) formulák alapján számított  $n$  és  $k$  értékek eléggé lényegesen eltérnek egymástól.

### 5. Az optikai állandók hibái

A 3. és 4. szakaszban számított optikai állandókkal kapcsolatban felmerül az a kérdés, hogy a negyedik szakaszban kapott állandók kívül esnek-e a szokásos módon nyert  $n$ -hez, ill.  $k$ -hoz tartozó hibahatárokon. E kérdés megválaszolása céljából foglalkozunk röviden az optikai állandók hibáit befolyásoló tényezőkkel.

A törésmutató és elnyelési együttható az ellipszometriás mérőműszerek alkalmazásakor a polarizációs jellemzők, jelen esetben  $\varphi$ ,  $q$  és  $\Delta$  függvényei:  $n = n(\varphi, q, \Delta)$ ,  $k = k(\varphi, q, \Delta)$ . Ezért a  $\delta n$ , ill.  $\delta k$  hiba nagysága először is

függ a mért  $\varphi$ ,  $q$  és  $\Delta$  mennyiségek hibáitól, vagyis a mérőműszer pontosságától, a mérési körülmények stabilitásától. Másodszor  $\delta n$ -et és  $\delta k$ -t nagymértékben befolyásolja az  $n(\varphi, q, \Delta)$  és  $k(\varphi, q, \Delta)$  függvények alakja; az alkalmazott számítási eljárás.

A mérőberendezés pontosságának kérdésével e helyen nem foglalkozunk, csak annyit jegyzünk meg, hogy az egyes mérőberendezések pontosságára jellemző a  $\delta I/I_0$  arány, ahol  $I_0$  a vizsgált minta felületére eső fény intenzitása,  $\delta I$  pedig az a minimális intenzitás változás, amelyet az érzékelő, a mérés körülményei közt meg tud különböztetni [10]. Korszerű mérőberendezéseknél elérhető a  $\delta I/I_0 = 0,005$  arány.



Rátérve a számítási eljárás megválasztásának hatására, megemlítjük, hogy A. P. Prisivalko [10] könyve részletesen elemzi az egyes eljárásoknak megfelelő hibákat (l. még [20], [21]). Az 1. és 2. táblázat adatait és a [10] 138. oldalán levő táblázatot összevetve azt találjuk, hogy az utóbbi táblázatban felsorolt ellipszometriás mérőműszerek ([11], [12], [14], [16], [15], [17], [18], [19], [20]) alkalmazása esetén, ha  $\delta I/I_0 = 0,005$ , akkor az 1. és 2. táblázatban előforduló  $n$  és  $k$  értékek relatív hibája többnyire kisebb, mint 10%:  $\delta n/n \leq 10\%$ ,  $\delta k/k \leq 10\%$ . Az 1. táblázatban szereplő optikai állandók egy jó részének hibája jóval kisebb, mint 10%; pl. [8] szerint nikkelre  $\lambda = 650$  nm-nél  $\delta n/n = 0,04 \cdot 100/1,91 = 2\%$ ,  $\delta k/k = 0,06 \cdot 100/3,93 = 1,5\%$ . Azonban, ha a felső becslésnek mondható 10%-os hibahatárt vesszük is figyelembe, akkor is azt látjuk, hogy a 3. táblázatban szereplő  $n$  és  $k$  értékek legnagyobb része kívül esik ezen a hibahatáron. Tehát a  $\mu = 1$  közelítéssel számolt optikai állandók lényegesen eltérnek azokról, melyeket e feltevés kihasználása nélkül, de lényegében ugyanazokból az ellipszometriás adatokból számítottunk ki. Pl. [8] szerint nikkel esetén  $\lambda = 650$  nm hullámhosszon  $n = 1,91 \pm 0,04$ ,  $k = 3,93 \pm 0,06$ ; ezzel szemben a 3. szakaszban ismertetett számítással nyert adatok ugyancsak  $\lambda = 650$  nm-nél:  $n = 1,533$ ,  $k = 3,195$ .

Magyarázatra szorul az a körülmény, hogy a 3. táblázatban  $n$  több helyen negatív előjellel szerepel. (Pl. nikkelre  $\lambda = 436$  nm-nél  $n = -5,065$ .) Ennek oka az, hogy ebben az esetben (4.4) formula  $I_2$ -re negatív értékeket ad. A (4.1) alatti gyökvonás miatt ekkor a következő esetek lehetségesek:  $n > 0$ ,  $k < 0$ ; vagy  $n < 0$ ,  $k > 0$ . Könnyen belátható, hogy az előbbi lehetőség fizikailag nem reális, ugyanis tekintsük a fémbe haladó síkhullám elektromos térerősségét megadó kifejezést [1]:

$$E_y = E_{0y} \cdot \exp\left(-\frac{\omega k x}{c}\right) \cdot \exp i\left(\omega t - \frac{\omega n x}{c}\right) \quad (5.1)$$

ahol

- $E_y$  az elektromos térerősség  $y$  komponense,
- $E_{0y}$  az elektromos térerősség  $y$  komponensének amplitúdója,
- $\omega$  a rezgés körfrekvenciája,
- $x$  az  $x$  térkoordináta,
- $t$  az idő,
- $c$  a fénysebesség.

Az  $yz$  koordináta-sík egybeesik a minta felületével.

Az (5.1) formulából látszik, hogy  $n > 0$ ,  $k < 0$  a fém belseje felé növekvő amplitúdójú térerősséget ír le. Ilyen hullám a tapasztalat szerint nem létezik. Evvel szemben az  $n < 0$ ,  $k > 0$  eset megvalósulása lehetséges. Ugyanis ekkor a térerősség amplitúdója a fém belseje felé csökken. A negatív törésmutató azt jelenti, hogy az azonos fázisú felületek a negatív  $x$  tengely irányába (a fémfelület felé) haladnak. Ez noha szokatlan, de fizikailag lehetséges.

A 8. szakaszban megvizsgáljuk azt a kérdést, hogy a 3. táblázat optikai állandói felhasználásával számított reflexióértékek milyen mértékben egyeznek a mért reflexióértékekkel.



### 6. A mágneses permeabilitás viselkedése nagy frekvenciákon

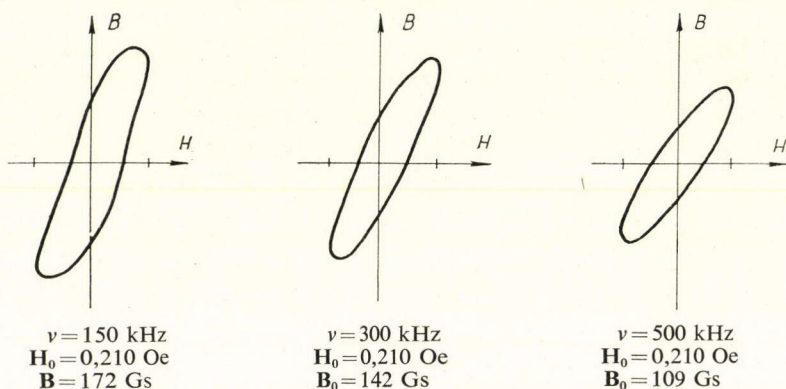
A  $B$  mágneses indukció általában a  $H$  mágneses térerősség függvénye:  $B = B(H)$ , ami sok anyagnál (pl. a ferromágneseknél) bonyolult, nem lineáris kapcsolatot jelent. Ilyen anyagoknál, ha a mágneses térerősség  $H_0$ -ról  $H_1$ -re változik, majd  $H_1$ -ről visszatér  $H_0$ -ra, akkor  $B$  a  $H_0H_1$  úton más értékeket vesz fel, mint a  $H_1H_0$  úton, az anyag mágneses állapota hiszterézis görbét ír le.

A hiszterézis görbe által bezárt terület megadja az egy ciklus alatt az anyag térfogat-egységében disszipált  $W_m$  energiát:

$$W_m = \frac{1}{4\pi} \oint H dB \quad (6.1)$$

Ha a mágneses térerősség, ill. indukció periodikusan változik, akkor az anyag mágneses állapota a hiszterézis hurok mentén körbe jár. Az ilyen dinamikus hiszterézis görbe rendszerint különbözik a statikusan felvett hiszterézis görbétől, alakja függ a mágneses indukció, ill. térerősség amplitúdójától, frekvenciájától és egy sor más tényezőtől.

A dinamikus hiszterézis görbét általában bonyolult függvény írja le. Azonban tapasztalati tény az, hogy gyenge mágneses terek, és nagy frekvenciák esetén a hiszterézis hurok jó közelítéssel ellipszis alakú [6]. A 3. ábra egy  $\mu = 350$  kezdeti permea-



3. ábra. Nikkel-cinkferrit mágneses hiszterézis görbéi egyenlő amplitúdójú térerősség ( $H_0 = 0,210 \text{ Oe}$ ) és három különböző frekvencia mellett

bilitással rendelkező nikkel-cinkferrit minta hiszterézis hurokjait mutatja egyenlő térerősség amplitúdók ( $H_0 = 0,210 \text{ Oe}$ ) és három különböző frekvencia mellett. Látható, hogy a frekvencia növekedésével az indukció amplitúdója csökken és a hurok fokozatosan ellipszis alakú lesz [22].

Ha a mágneses térerősséget és indukciót harmonikus rezgés írja le, akkor az ellipszis alakú hiszterézis görbét a következő összefüggések jellemzik:

$$H = H_0 \exp i \cdot \omega t \quad (6.2)$$

$$B = B_0 \cdot \exp i[\omega t - \delta_m] = \mu \cdot H_0 \exp i \cdot \omega t = |\mu| \exp [-i \cdot \delta_m] H_0 \exp i \cdot \omega t \quad (6.3)$$

( $H$ -ből és  $B$ -ből a közös térkoordinátáktól függő szorzót elhagytuk.)



Tehát a

$$\mu = |\mu| \exp[-i\delta_m] = \mu_1 - i\mu_2 \quad (6.4)$$

komplex permeabilitás azt a közelítést tükrözi, hogy a hiszterézis hurkot ellipszisnek tekintjük. Kimutatható, hogy ebben az esetben az egy periódus alatt disszipált  $W_m$  energia arányos  $\mu_2$ -vel, ill.  $\operatorname{tg} \delta_m$ -mel:

$$W_m = \frac{1}{4} \cdot \mu_2 \cdot \mathbf{H}_0^2 = \frac{1}{4} \cdot \mu_1 \cdot \operatorname{tg} \delta_m \cdot \mathbf{H}_0^2 \quad (6.5)$$

Ha egy anyagban olyan elektromágneses síkhullámok haladnak, melyek frekvenciája nagyobb, mint  $10^{10}$  Hz, és amplitúdójuk nem nagy, akkor valószínűnek látszik, hogy a hiszterézis görbét közelíthetjük ellipszissel, vagyis számolhatunk a (6.4) alatti komplex permeabilitással. Természetesen az ellipszis egyenessé is fajulhat, ilyenkor  $\mu_2 = 0$ .

Felmerül már most az a kérdés, hogy lehetséges-e ellipszometriás adatokból információt kapni  $\mu = \mu_1 - i\mu_2$ -re. A következő szakaszban megkísérelünk választ adni erre a kérdésre.

## 7. A mágneses permeabilitás meghatározása az optikai spektrum tartományban

A (2.9) alatti formula lehetővé teszi, hogy a  $\mu = \mu_1 - i\mu_2$  komplex permeabilitást az ellipszometriásan mérhető mennyiségek és az optikai állandók függvényében kiszámítsuk. A [23] dolgozatban bizonyítottuk, hogy  $\mu$  a következő másodfokú egyenlet gyöke

$$\mu^2 A_0 + \mu B_0 + C_0 = 0 \quad (7.1)$$

innen a komplex mágneses permeabilitás kiszámítható:

$$\mu_{[1,2]} = (\mu_1 - i\mu_2)_{[1,2]} = \frac{-B_0 \pm \sqrt{B_0^2 - 4A_0 \cdot C_0}}{2A_0} \quad (7.2)$$

ahol

$$A_0 = a_1 + i \cdot a_2 \quad (7.3)$$

$$B_0 = b_1 + i \cdot b_2 \quad (7.4)$$

$$C_0 = c_1 + i \cdot c_2 \quad (7.5)$$

$$a_1 = p \cdot \cos \alpha \quad (7.6)$$

$$a_2 = p \cdot \sin \alpha \quad (7.7)$$

$$b_1 = H[(n^2 - k^2 - 1) \cdot F + 2n \cdot k \cdot G] \quad (7.8)$$

$$b_2 = H[(n^2 - k^2 - 1) \cdot G - 2n \cdot k \cdot F] \quad (7.9)$$

$$c_1 = -p[(n^2 - k^2) \cos \alpha + 2n \cdot k \cdot \sin \alpha] \quad (7.10)$$

$$c_2 = -p[(n^2 - k^2) \sin \alpha - 2n \cdot k \cdot \cos \alpha] \quad (7.11)$$



## 4. TÁBLÁZAT

Komplex mágneses permeabilitás  $\mu = \mu_1 - i\mu_2 = |\mu| \exp(-i\delta_m)$   
 $\mu_{(1)}$  és  $\mu_{(2)}$  a (7.1) egyenlet két komplex gyöke

Anyag	$\lambda$ [nm]	$\mu_{(1)}$ $\mu_{(2)}$			
		$\mu_1$	$\mu_2$	$ \mu $	$\delta_m$
Fe	589	11,2387	6,8714	13,1729	31,44°
		0,2111	0,1739	0,2735	39,48
Co	231	0,8311	-0,5593	1,0018	-33,94
		-0,9474	0,0601	0,9493	-3,63*
	275	5,5232	3,4959	6,5366	32,33
		0,1575	0,3161	0,3532	63,51
	347	5,9221	4,0355	7,1663	34,27
		0,1656	0,1974	0,2577	50,00
	395	9,4999	6,3570	11,4346	33,79
		0,2202	0,2669	0,3460	50,48
	440	11,5711	8,2194	14,1933	35,39
		0,2972	0,1736	0,3442	30,29
	450	9,5200	9,2134	13,2483	44,06
		0,2551	-0,1275	0,2852	-26,56
Ni	500	13,3408	8,8571	16,0133	33,58
		0,1443	0,2446	0,2840	59,46
	560	13,4964	8,4863	15,9427	32,16
		0,1037	0,3191	0,3355	71,99
	420	5,9723	4,7859	7,6533	38,71
		0,2250	0,0630	0,2337	15,64
	436	0,6554	0,6156	0,8992	43,21
		-17,8576	-12,8584	22,0053	35,76*
	492	0,5433	0,7119	0,8955	52,65
		-14,8845	-8,2644	17,0249	29,04*
	500	2,2803	1,7549	2,8774	37,58
		-0,1992	0,3025	0,3622	-56,63*
Pt	578	0,6570	0,6845	0,9488	46,17
		-19,0271	-13,3889	23,2657	35,13*
	589	9,8037	8,4868	12,9668	40,88
		0,2643	-0,0586	0,2707	12,50
	615	0,4627	0,1112	0,4759	13,51
		-16,3686	-16,1231	22,9758	44,57*
	650	16,7589	11,5860	20,3739	34,66
		0,2513	0,2547	0,3578	45,38
	589	2,4405	-0,1662	2,4462	-3,90
		-0,4930	-0,1170	0,5667	13,35*
	Na	0,1277	0,1297	0,1820	45,44
		-2,1184	0,2191	2,1297	-5,90*
Cu	589	2,0605	-2,0501	2,9666	-44,85
		-0,9510	0,0004	0,9510	0,02*
Ag	589	-0,1652	0,0484	0,1721	-16,33*
		-3,6683	4,6455	5,9192	51,70*
Au	589	3,8668	-9,0492	9,8407	-66,86
		0,1613	0,3579	0,3926	65,74

\* +180°



$$p = \sqrt[4]{(n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi)^2 + 4n^2 \cdot k^2} \quad (7.12)$$

$$\operatorname{tg} 2\alpha = \frac{-2n \cdot k}{n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi} \quad (7.13)$$

$$F = \frac{\cos 2\varrho}{1 - \sin 2\varrho \cdot \cos \Delta} \quad (7.14)$$

$$G = \frac{-\sin 2\varrho \cdot \sin \Delta}{1 - \sin 2\varrho \cdot \cos \Delta} \quad (7.15)$$

$$H = \sin \varphi \cdot \operatorname{tg} \varphi \quad (7.16)$$

A (7.2)—(7.16) formulákban  $n$  és  $k$  azon értékeivel kell számolni, melyek meghatározásánál nem használtuk fel a  $\mu = 1$  feltevést. A számítás kissé egyszerűsödik, ha a fő beesési szöghöz tartozó adatokat helyettesítjük be:  $\varphi = \Phi$ ,  $\varrho = \varrho_f$ ,  $\Delta = \frac{\pi}{2}$ .

Az 1. táblázatban szereplő  $\Phi$ ,  $\varrho_f$  értékeket és a 3. táblázatban felsorolt  $n$  és  $k$  értékeket a (7.2)—(7.16) formulákba írva kiszámítottuk a komplex mágneses permeabilitást vas, kobalt, nikkel, platina, nátrium, réz, ezüst és arany esetére néhány hullámhossznál. Itt jegyezzük meg, hogy a dolgozatban szereplő számításokat a MOM Zuse Z 23 típusú számítógépén végeztük.

A számítás eredményét a 4. táblázat tartalmazza, melyben feltüntettük a (7.1) egyenlet mindkét gyökét. Azt, hogy a két gyök közül melyik a tényleges anyagjellemző, nem könnyű eldönteni. A következő szakaszban ismertetünk egy empirikus eljárást, mellyel el lehet dönteni, melyik  $\mu$  érték felel meg jobban a kísérleti tapasztalatoknak.

A 4. táblázat feltünteti a komplex permeabilitások  $|\mu|$  abszolút értékét és  $\delta_m$  fázisát is. Látható, hogy  $|\mu|$  a legtöbb helyen eltér 1-től. Ezenkívül  $\mu$  képzetes része ( $\mu_2$ ) általában zérustól különbözik, ami (6.5) szerint arra utal, hogy a fény esetében is fellép mágneses hiszterézis miatti energia disszipáció.

## 8. A reflexió kiszámítása a mágneses permeabilitás és az optikai állandók értékéből

Ismeretes [1], hogy a merőleges beesésre vonatkozó  $R_{c1}$  reflexiót a következő formula szolgáltatja:

$$R_{c1} = \frac{(n - \mu_1)^2 + (k - \mu_2)^2}{(n + \mu_1)^2 + (k + \mu_2)^2} \quad (8.1)$$

Abban az esetben, ha  $\mu = 1$ , (8.1) a következő alakot veszi fel:

$$R_{c2} = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \quad (8.2)$$

Ha tehát ismerjük az  $n = n - ik$  komplex törésmutatót és a  $\mu = \mu_1 - i\mu_2$  komplex mágneses permeabilitást, akkor  $R_{c1}$ , ill.  $R_{c2}$  kiszámítható. Hasonlítsuk össze a spekt-



## 5. TÁBLÁZAT

A spektrális reflexió  $R_{c1}$ ,  $R_{c2}$  számított értékeinek összehasonlítása az  $R_m$  mért értékkel

Anyag	$\lambda$ [nm]	$R_{c1}$ $R_{c2}$ (8.1)	$R_m$ [8]	$R_{c2}$ [8] (8.2)
Fe	589	0,543 0,669	0,553	0,584
Co	231	0,361 8,366		0,318
	275	0,357 0,476		0,457
	347	0,442 0,542		0,511
	395	0,457 0,591		0,577
	440	0,509 0,671		0,611
	450	0,602 1,1347		0,633
	500	0,543 0,664		0,655
	560	0,509 0,651		0,653
Ni	420	0,491 0,687	0,566	0,537
	436	1,229 0,639	0,581	0,619
	492	1,056 0,612	0,607	0,631
	500	0,364 2,011	0,608	0,597
	578	1,177 0,656	0,639	0,644
	589	0,591 0,959	0,644	0,620
	615	1,379 0,700	0,651	0,663
	650	0,546 0,682	0,672	0,678
Pt	589	0,094 2,413		0,674
Na	589	1,357 0,189		0,971*
Cu	589	0,458 5,063	0,640	0,741
Ag	589	0,853 0,541	0,927	0,950
Au	589	0,460 1,972		0,82*

\*) [25]-ből vett adat

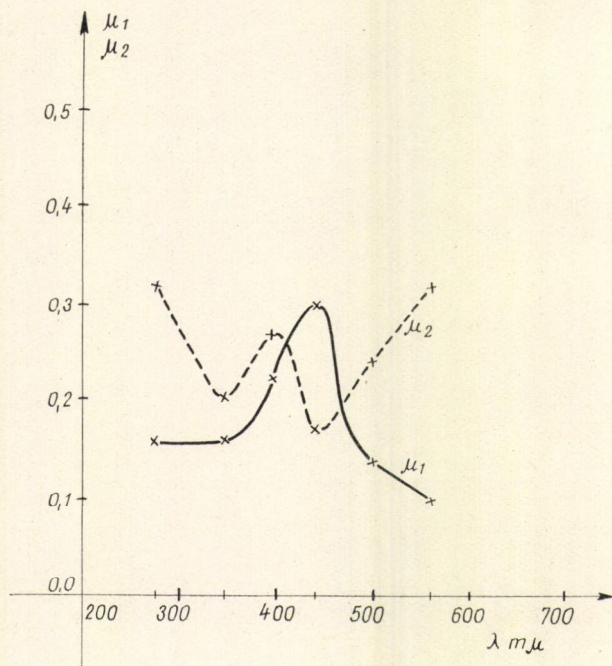
rális reflexió  $R_m$  mért értékét  $R_{c1}$ -el és  $R_{c2}$ -vel. Az 5. táblázatban felsoroltuk a (8.1)-ből a 3. táblázat optikai állandói és a 4. táblázat mágneses permeabilitásai felhasználásával számított  $R_{c1}$  értékeket, a (8.2) formula alapján számolt  $R_{c2}$  reflexiókat és a megfelelő  $R_m$  értékeket. (Az  $R_{c2}$  és  $R_m$  értékek [8]-ból származnak.)

Az 5. táblázatot szemlélve kitűnik, hogy az adatok egy részénél a (7.1) egyenlet két gyöke közül könnyen kiválaszthatjuk a fizikailag reálisat. Ugyanis azt a  $\mu$  értéket, melyre  $R_{c1} > 1$  fizikailag értelmetlennek minősíthetjük. Abban az esetben, ha mindkét gyökkel számított  $R_{c1} < 1$ , akkor az a  $\mu$  felel meg jobban a tapasztalatnak, melyre  $R_c$  közelebb van a mért  $R_m$ -hez. A kobalttra vonatkozó, ilyen módon kiválogatott  $\mu_1, \mu_2$  értékeket a hullámhossz függvényében a 4. ábra mutatja. Előnyösen ábrázolható  $\mu(\lambda) = \mu_1 - i\mu_2$  a komplex számsíkon is, az 5. ábra egy ilyen diagramot mutat.

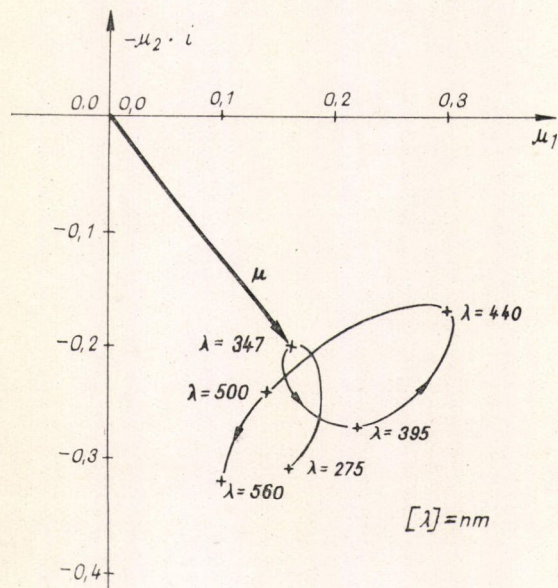
Az 5. táblázatban szereplő adatok vizsgálata azt mutatja, hogy a számított  $R_{c1}$  különösen ferromágneses anyagoknál elég jól megközelíti a mért  $R_m$  reflexiót. Ez azt jelenti, hogy a negyedik szakaszban számított optikai állandóknak — melyek között negatív törésmutatók is szerepeltek — és a hetedik szakaszban számított  $\mu = \mu_1 - i\mu_2$  komplex permeabilitásnak a szóban forgó hullámhossz tartományban van bizonyos fizikai realitása.

Rá kell mutatni azonban arra is, hogy az 5. táblázatban felsorolt  $R_{c1}$ -ek közül csak kettő (Fe,  $\lambda = 589$  nm; Ni,  $\lambda = 492$  nm) közelíti meg jobban a mért  $R_m$  reflexióértéket, mint a régi formulák alapján számolt  $R_{c2}$ . Evvel kapcsolatban megemlítünk egy körülményt, mely a  $\mu \neq 1$ -re vonatkozó számításokban hibát vihet.





4. ábra. Kobalt mágneses spektruma az optikai hullámhossz tartományban:  $\mu_1(\lambda)$ ;  $\mu_2(\lambda)$



5. ábra. A  $\mu(\lambda) = \mu_1 - i\mu_2$  permeabilitás ábrázolása a komplex számsíkon kobaltra



A 2. táblázatban szereplő  $\Delta$  fáziskülönbség és  $\varrho$  azimut értékek egy részét A. P. Prisivalko [10] könyvében található  $\Delta = \Delta(n, k, \varphi)$  és  $\varrho = \varrho(n, k, \varphi)$  táblázatokból interpoláltuk. E táblázatok a

$$\operatorname{tg} \Delta = \frac{-\sin \varphi \cdot \operatorname{tg} \varphi \cdot \sqrt{2} \sqrt{\sqrt{(n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi)^2 + 4n^2 k^2} - (n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi)}}{\sin^2 \varphi \cdot \operatorname{tg}^2 \varphi - \sqrt{(n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi)^2 + 4n^2 k^2}} \quad (8.3)$$

$$\operatorname{tg} 2\varrho = \frac{1}{\sin \Delta} \cdot \frac{\sqrt{[\sqrt{(n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi)^2 + 4n^2 k^2} - (n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi)]}}{\sqrt{[\sqrt{(n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi)^2 + 4n^2 k^2} + n^2 - k^2 - \sin^2 \varphi]}} \quad (8.4)$$

formulák alapján készültek ([10], 25. old.). Viszont a (8.3), (8.4) formulák levezetésénél kihasználják a  $\mu=1$  feltevést. Tehát a (8.3), (8.4) formulákból kapott  $\Delta$  és  $\varrho$  értékek bizonyos hibát visznek a 4. szakaszban leírt számításokba, melyek éppen a  $\mu \neq 1$  esetre vonatkoznak.

### 9. A dielektromos állandó és vezetőképesség kiszámítása az optikai spektrum tartományban, ha $\mu \neq 1$

Az optikai állandók és a mágneses permeabilitás ismeretében ki lehet számítani az  $\varepsilon(\nu)$  dielektromos állandót és a  $\sigma(\nu)$  vezetőképességet az optikai spektrum tartományban. Ugyanis  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$ ,  $n$  és  $k$  között fennáll a következő összefüggés:

$$n^2 = (n - i \cdot k)^2 = \varepsilon' \mu = \left( \varepsilon - i \frac{2\sigma}{\nu} \right) (\mu_1 - i \cdot \mu_2) \quad (9.1)$$

Tegyük fel, hogy  $\varepsilon$  és  $\sigma$  valós mennyiségek. Ekkor (9.1)-et átalakítva majd a valós és képzetes részeket szétválasztva a következő egyenletrendszert kapjuk  $\varepsilon$ -re és  $\sigma$ -ra:

$$\varepsilon \cdot \mu_1 - \frac{2\sigma}{\nu} \mu_2 = n^2 - k^2 \quad (9.2)$$

$$\varepsilon \cdot \mu_2 + \frac{2\sigma}{\nu} \mu_1 = 2n \cdot k \quad (9.3)$$

A (9.2), (9.3) egyenletrendszerből kiszámíthatjuk  $\varepsilon$ -t és  $\sigma$ -t:

$$\varepsilon = \frac{\mu_1(n^2 - k^2) + 2\mu_2 \cdot n \cdot k}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \quad (9.4)$$

$$\sigma = \frac{\nu [2n \cdot k \cdot \mu_1 - (n^2 - k^2) \cdot \mu_2]}{2(\mu_1^2 + \mu_2^2)} \quad (9.5)$$

Ha  $\mu_2=0$  és  $\mu=\mu_1=1$ , akkor (9.4), illetve (9.5) a szokásos formulába megy át

$$\varepsilon = n^2 - k^2 \quad (9.6)$$

$$\sigma = n \cdot k \cdot \nu \quad (9.7)$$



### 10. Következtetések

Ugyanazokból a  $\varphi$ ,  $\varrho$ ,  $\Delta$  polarizációs adatokból kiindulva kétféle módon számítottuk ki az  $n$  törésmutatót és  $k$  elnyelési együtthatót. Az első számítási eljárás (3. szakasz) a  $\mu=1$  feltevésre támaszkodik, a második (4. szakasz) nem használja ki ezt. Az első számítás, mely lényegében a jelenlegi gyakorlatnak felel meg,  $n$  és  $k$  irodalmi értékeit adja meg. A második számítás által kapott törésmutatók és elnyelési együtthatók — a valószínű hibahatárokat figyelembe véve — eltérnek az első számításból származó optikai állandóktól. Úgy véljük, hogy ez az eltérés csak részben származik a felhasznált  $\varphi$ ,  $\varrho$  és  $\Delta$  adatok pontatlanságából. A  $\mu$  mágneses permeabilitás figyelembevétele az optikai konstansok eltéréseben jelentkezik.

A negyedik szakaszban kapott  $n$ -eket és  $k$ -kat, valamint a megfelelő  $\Phi$  fő beesési szögeket és  $\varrho_f$  fő azimutokat felhasználva kiszámítottuk néhány anyagra az optikai spektrum tartományba eső hullámhosszakhoz tartozó  $\mu(\lambda) = \mu_1 - i \cdot \mu_2$  komplex permeabilitást. A 7. szakasz eredményei azt mutatják, hogy  $\mu$  abszolút értéke eléggé eltér 1-től,  $\mu_2$  pedig eltér zérustól. Ez az utóbbi körülmény arra enged következtetni, hogy az optikai spektrum tartományban is fellép mágneses hiszterézis miatti energia disszipáció.

Az  $n$ ,  $k$  és  $\mu$ -ból számolt reflexió értékek eléggé jól megközelítik a mért spektrális reflexióértékeket ( $n$  és  $k$  itt a 4. szakaszban számolt optikai állandókat jelentik). Ez arra mutat, hogy a kapott  $n$ ,  $k$  és  $\mu$  bizonyos fizikai tartalommal bír.

Végezetül szeretnénk utalni arra, hogy a korszerű ellipszometriás mérés technika lehetővé teszi az optikai konstansoknak a korábbinál lényegesen pontosabb meghatározását. Gondolunk itt pl. az ultra nagy vákuumban, nagy tisztaságú anyagokon, laser fényforrások alkalmazásával végzett polarizációs mérések lehetőségére. Valószínű, hogy az ilyen mérésekből származó  $\varphi$ ,  $\varrho$  és  $\Delta$  polarizációs jellemzők és spektrális reflexió értékek felhasználásával az optikai állandókról és a mágneses permeabilitásról az eddigieknél részletesebb információk nyerhetők.



## IRODALOM

1. Соколов, А. В.: Оптические свойства металлов. Государственное Издательство Физико-Математической Литературы, Москва, 1961.
2. Hagen, E., Rubens, H., Ann. d. Phys., 11, 873, 1903.
3. Аркадьев, В. К., Ж. Р. Ф. X. О.-Ч. Ф., 44, 165, 1912.
4. Landolt—Börnstein: Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik. 6. Auflage II. Band. Magnetische Eigenschaften I., 2—13. Springer-Verlag, Berlin—Göttingen—Heidelberg 1962.
5. Epstein, D. J.: Boston Conference on Magnetism and Magnetic Materials, A. I. E. E., 498, 1957.
6. Polivanov, K. M.: Ferromágneses anyagok. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1960.
7. Hoffmann Gy., Kép- és hangtechnika, 14, 9, 1968.
8. Ingersoll, L. F., Astrophys. Journ., 32, 265, 1910.
9. Drude, P., Ann. d. Phys. und Chem. 39, 481, 1890.
10. Пришивалко, А. П.: Отражение света от поглощающих сред. Издательство Академии Наук Белорусской ССР, Минск, 1963.
11. Beattie, J. R., Conn, G. K. T., Phil. Mag. 46, 222, 1955.
12. Beattie, J. R., Phil. Mag., 46, 235, 1955.
13. Бахшиев, Н. Г., Опт. и спектр., 2, 818, 1957.
14. Försterling, K. Freedericksz Ann. d. Phys. 40, 201, 1913.
15. Conn, G. K. T., Eaton, G. K., J. Opt. Soc. Am. 44, 484, 1954.
16. Шкляревский, И. Н., Уч. зап. X. Г. У. Тр. физ. отд. 7, 325, 1958.
17. Мотулевич, Г. П., Шубин, А. А., Опт. и Спектр. 2, 633, 1957.
18. Conn, G. K. T., Eaton, G. K., J. Opt. Soc. Am., 44, 546, 1954.
19. Пришивалко, А. П., Опт. и Спектр. 9, 493, 1960.
20. Пришивалко, А. П.: Отражение света от поглощающих сре. и точность методов определения оптических постоянных. Диссертация, Минск, 1961.
21. Пришивалко, А. П., ДАН БССР, 5, 433, 1961.
22. Рабкин, Л. И., Известия А. Н. СССР. серия физич. 18, № 4., 473, 1954.
23. Hoffman Gy., Magyar Tud. Akad. VI. Osztály közleményei, 40, 287, 1968.
24. Drude, P., Ann. d. Phys. und Chemie, Neue Folge, 64, 159, 1898.
25. Hodgman, Ch. D., Handbook Chemistry and Physics. The Chemical Rubber Publishing Co. Cleveland, Ohio 1962—63. 44. th. ed.



# MÁGNESES SZERKEZETEK ÉS FÁZISÁTALAKULÁSOK VIZSGÁLATA A MÁSODRENDŰ FÁZISÁTALAKULÁSOK LANDAU ELMÉLETE ALAPJÁN\*

SÓLYOM JENŐ

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet  
Szilárdtestfizikai Főosztály, Budapest

## Tartalom

<i>Bevezetés</i> .....	523
I. Kristálytani alapfogalmak .....	526
1. Tércsoportok és ábrázolásai .....	526
a) Pontcsoportok .....	526
b) Bravais-rács, kristályrendszerek .....	527
c) Kristályosztályok és tércsoportok .....	527
d) Tércsoportok irreducibilis ábrázolásai .....	528
II. A másodrendű fázisátalakulások Landau-elmélete .....	530
1. Az első- és másodrendű fázisátalakulások jellemzése .....	530
2. A másodrendű fázisátalakulások Landau-féle termodinamikai elmélete .....	531
3. A szimmetria változása másodrendű fázisátalakuláskor .....	533
III. A Landau-elmélet alkalmazása mágneses szerkezetek meghatározására .....	538
1. Mangán alapú ötvözetek mágneses szerkezete .....	538
a) A $\gamma$ mangán antiferromágneses szerkezete .....	539
b) $Mn_3Pt$ és $Mn_3Rh$ mágneses szerkezete .....	545
c) $MnPt$ és $MnPd$ mágneses szerkezete .....	550
2. $FeGe_2$ mágneses szerkezete .....	552
IV. Több lépésű mágneses fázisátalakulások .....	553
1. A több lépésű fázisátalakulások elmélete .....	553
2. A $MnSO_4$ lehetséges mágneses fázisátalakulásai .....	554
V. Kvázi-fázisátalakulás .....	557
1. A kvázi-fázisátalakulás fogalma .....	557
2. A vivianit szerkezete és fázisátalakulásai .....	559
Összefoglalás, következtetések .....	560
Köszönetnyilvánítás .....	561
Irodalom .....	561
Függelék .....	563
1. Bravais-rács típusok .....	563
2. A Kovaljev-feltétel bizonyítása .....	563
3. $\chi^{(k,m)}(h')$ meghatározása .....	564
4. A szimmetriaműveletek jelölése .....	565

## Bevezetés

A szilárd anyagok mágnességének vizsgálatában az utóbbi időben igen lényeges helyet kapott a mágneses szerkezetek és mágneses fázisátalakulások tanulmányozása. A klasszikus mágneses anyagok, a vas, kobalt, nikkell és ezek ötvözei ferromágnesesek, vagyis olyan anyagok, melyekben az egyes atomok mágneses momentumai párhuzamosan egymás hatását erősítik. 1932-ben Néel [1] néhány átmeneti fém (króm és mangán) és ötvözeik szuszceptibilitásának hőmérséklet-függését annak

\* Érkezett 1970. febr. 26. Kandidátusi disszertáció



a feltevésnek a segítségével magyarázta meg, hogy a kristályban két alrács van, melyeken belül az atomok momentumai paralelen egy irányban állnak, a két alrácson viszont egymáshoz képest antiparalelen, és így kikompenzálják egymást. Néeltől függetlenül Landau [2] szimmetriamegfontolásokkal jutott ilyen szerkezet feltételezésére. Ez a szerkezet kapta az antiferromágneses elnevezést. Az utóbbi két évtizedben intenzíven megindult kutatás, elsősorban a neutrondiffrakciós mérések, az egyszerű két-alrácsos antiferromágneses szerkezeténél bonyolultabb szerkezetek felfedezésére vezetett. A ritka földfémek esetén például nem kollineáris csavarszerkezetet, egyes spinelekben pedig háromszögszerkezetet is észleltek.

A különböző típusú mágneses szerkezetek megjelenése a mágneses momentumok között fellépő közvetlen vagy közvetett kölcsönhatások következménye. A legényegesebb ezek közt a direkt kicserélődés, a Kramers-féle szuperkicserélődés, ill. a vezetési elektronok által közvetített kicserélődési kölcsönhatás. A kicserélődési kölcsönhatás csak a momentumok egymáshoz képesti viszonyát szabja meg, azt, hogy azok paralelen vagy antiparalelen álljanak, esetleg bonyolultabb nem kollineáris szerkezetet, pl. háromszögszerkezetet alkossanak. A mágneses momentumoknak a kristálytani tengelyekhez képesti elhelyezkedését a kicserélődési kölcsönhatásnál gyengébb anizotrópia erőik, a spin-pálya kölcsönhatás határozza meg. A hőmérséklet változásával a különböző kölcsönhatások egymáshoz képesti erőssége változik, és ennek következtében az addig stabilis szerkezet instabilissá válhat és más mágneses momentum eloszlás jöhet létre. Magas hőmérsékleten a termikus energia már legyőzheti a spineket beállító kicserélődési kölcsönhatást, a spinek szabaddá válnak, és minden atomon időbeli átlagban a momentum zérus. Ezt a fázist nevezzük paramágneses fázisnak.

A különböző mágneses fázisok közötti átalakulásokat vizsgálva, ide értve természetesen a nem mágneses (paramágneses) — mágneses átalakulást is, a következő kérdéseket vehetjük fel:

1. milyen mágneses szerkezetek valósulhatnak meg és milyen mágneses fázis-átalakulások játszódhatnak le egy kristályban,

2. melyek azok a kölcsönhatások, amelyek a mágneses szerkezetet elsősorban meghatározzák, és a hőmérséklet változásával hogyan változik a kölcsönhatások erőssége,

3. hogyan jelentkezik a fázisátalakulás a termodinamikai mennyiségekben (a fajhő, szuszceptibilitás anomáliája, a mágnesezettség, rácsállandó változása).

Mindhárom kérdéskör megválaszolására folynak elméleti és kísérleti kutatások. Jelen dolgozatban az első kérdéssel kívánunk foglalkozni, vagyis azt fogjuk elméletileg vizsgálni, hogy milyen mágneses szerkezet alakulhat ki egy kristályban, ill. egy kísérletileg megfigyelt mágneses szerkezetnél azt nézzük, hogy milyen esetleges közbenső fázisokon keresztül jöhetett létre.

Egy adott kristályszerkezetnél a lehetséges mágneses szerkezetek meghatározására három út kínálkozik. Az egyik eljárás Luttinger és Tisza [3] nevéhez fűződik, később Lyons és Kaplan [4] általánosították a módszert. Az alap gondolat az volt, hogy feltételezve egy  $J(f-g)$  kicserélődési kölcsönhatást az  $f$  és  $g$  rácspontban ülő spinek között, meghatározták, hogy milyen spin-konfiguráció esetén lesz a Heisenberg-modell Hamilton-operátorából molekuláris tér közelítésben kapható

$$E = - \sum_{f,g} J(f-g) \vec{S}_f \vec{S}_g \quad (1)$$



mágneses energia minimális. Hasonló eredményeket ad az az eljárás, melyben egy adott konfigurációhoz molekuláris tér közelítésben meghatározzák a Néel-pontot és feltételezik, hogy az a szerkezet lesz a Néel-pont alatti teljes hőmérséklettartományban stabilis, melyhez a legmagasabb Néel-pont tartozik. Mindkét módszerrel tulajdonképpen az alapállapotú spinkonfigurációt lehet meghatározni a kicserélődési kölcsönhatások relatív erősségének függvényében. A spinhullám-elmélet első korrekciójának figyelembevétele [5] egy kis módosítást okoz az így kapott fázisdiagramban. Ez a két módszer bizonyos felvilágosítást ad a második problémakörre is, hiszen egy szerkezet megfigyelése esetén visszakövetkeztethetünk a kicserélődési kölcsönhatások relatív erősségére, sőt még elvben az anizotrópia tagokat is figyelembe lehet venni (1)-ben.

Egészen más oldalról közelíti meg a problémát a másodrendű fázisátalakulások Landau-féle elmélete [6]. Ez az elmélet a paramágneses fázisból másodrendű fázisátalakulással kialakuló mágneses fázis szerkezetének meghatározására alkalmas. A módszer legnagyobb sikerét a gyenge ferromágnesség értelmezésével érte el [7]. Ha a mágneses anyagban több fázisátalakulás játszódik le, akkor itt egy magas hőmérsékleti fázis szerkezetét kapjuk, szemben az előbbi módszerekkel, melyekben az alapállapotú momentum-eloszlást lehetett meghatározni. Látni fogjuk, hogy a Landau-elmélet a többi fázisátalakulás vizsgálatára is alkalmas, ha az átalakulások mind másodrendűek. Az előbb említett módszerekkel szemben megvan az az előnye is ennek az elméletnek, hogy nincs egy konkrét Hamilton-operátorhoz és a momentumok szorzatában négyzetes energiakifejezéshez kötve. Ez az elmélet a harmadik kérdéskörre is ad választ, meghatározható ugyanis a mágneszettség, szuszceptibilitás, fahő hőmérsékletfüggése az átalakulási pont közelében. Itt is az effektív tér módszerek egy változatával állunk szemben és ezért a nyert eredmények csak közelítő érvényűek. A fázisátalakulási pont közvetlen közelében a termodinamikai viselkedést illetően a kísérletek eltérést mutatnak az elmélet eredményeitől, a lehetséges szerkezetekre vonatkozóan viszont nincs olyan pontos mérés, mely eltérést jelezn.

A dolgozatban a Landau-elméletnek a másodrendű fázisátalakulások során kialakuló mágneses szerkezetek szimmetriájára vonatkozó állításaival foglalkozunk.

Az I. fejezetben a későbbiek során felhasználásra kerülő kristálytani fogalmakat ismertetjük, különös tekintettel a kristályok osztályozásánál előforduló tércsoportokra és azok irreducibilis ábrázolására.

A II. fejezet a másodrendű fázisátalakulások Landau-féle elméletét ismerteti. A másodrendű átalakulások definiálása után meghatározzuk a termodinamikai mennyiségek hőmérsékletfüggését az átalakulási pont közelében, majd leírjuk, hogyan lehet meghatározni egy adott kristályszerkezetnél a paramágneses fázisból kialakuló mágneses szerkezeteket.

A III. fejezet az elmélet néhány alkalmazását mutatja be. Meghatározzuk néhány mangán alapú ötvözet lehetséges mágneses szerkezetét, melyek közül azután már a neutrontdiffrakciós mérések eredménye alapján lehet kiválasztani a természetben megvalósuló szerkezetet. Megvizsgáljuk az  $\text{FeGe}_2$  szerkezetét is.

A IV. fejezetben a több egymás utáni másodrendű fázisátalakulással kialakuló szerkezetek vizsgálatára általánosítjuk a korábbi eredményeket. Alkalmazásképpen  $\text{MnSO}_4$  bonyolult mágneses szerkezetét vizsgáljuk.

Az V. fejezetben egy további általánosításképpen bevezetjük a kvázi fázisátalakulás fogalmát. Itt is egy konkrét példán, a vivianit szerkezetén mutatjuk be, mit is értünk ezen.



Végül összefoglaljuk az elmélet alkalmazásával és általánosításával kapott eredményeket, valamint a kísérletekkel való összehasonlítás eredményét, és rámutatunk a további kísérletekre, melyek az elméleti eredmények igazolását szolgálhatnák.

## I. Kristálytani alapfogalmak

A csoportelmélet alapjait ismertnek tételezve fel [8], az alábbiakban röviden ismertetjük a tércsoportokat; valamint azok irreducibilis ábrázolásainak előállításí módját.

### 1. Tércsoportok és ábrázolásaik

#### a) Pontcsoportok

Pontcsoportnak nevezzük a teljes ortogonális csoport azon diszkrét alcsoportjait, melyek  $\frac{2\pi}{n}$  szögű forgásból és inverzióból vagy ezek kombinációjából állnak. A forgástengelyek és az inverziós centrum úgy van elhelyezve, hogy egy pont mindig változatlanul marad. A pontcsoportokat aszerint különböztetjük meg, hogy hány és milyen forgástengely szerepel bennük. Az elsőfajú pontcsoportokban csak forgatásos elemek vannak, a másodfajúakban inverzió vagy tükrözés is. Az alábbiakban felsoroljuk a pontcsoportokat, mert az itt bevezetendő jelölések a tércsoportok leírásánál is előfordulnak.

### ELSŐFAJÚ PONTCSOPORTOK:

1.  $C_n$  (egytengelyű csoport): egy tengely körüli  $\frac{2\pi}{n}$ -szögű forgásokat tartalmaz,
2.  $D_n$  (diéderes csoport): egy  $n$ -edrendű forgástengelyt és  $n$  erre merőlegesen elhelyezett kétforgású forgástengelyt tartalmaz,
3.  $T$  (tetraéderes csoport): egy szabályos tetraédert önmagába vivő négy harmadrendű és három másodrendű tengelyt tartalmaz,
4.  $O$  (oktaéderes csoport): egy kockát önmagába vivő forgásokat tartalmazza,
5.  $Y$  (ikosaéderes csoport): a szabályos ötszögű dodekaédert önmagába vivő forgásokat tartalmazza.

### MÁSODFAJÚ PONTCSOPORTOK:

1.  $S_{2n}$ : egy tengely körüli  $\frac{\pi}{n}$ -szögű forgás után a tengelyre merőleges síkra tükrözünk,
2.  $C_{nh}$ : az  $n$  értékű forgástengelyen kívül egy arra merőleges tükrősíkot is tartalmaz,
3.  $C_{nv}$ : az  $n$ -edrendű forgástengelyen kívül  $n$  számú, a tengelyen átmenő tükrősíkot tartalmaz, a szabályos  $n$  oldalú gúla szimmetriaelemeit tartalmazza,
4.  $D_{nh}$ :  $D_n$  szimmetriaelemein kívül egy az  $n$ -edrendű tengelyre merőleges tükrősíkot tartalmaz, vagyis a szabályos  $n$ -oldalú hasáb szimmetriaelemeit,



5.  $D_{nd}$ :  $D_n$  szimmetriaelemein kívül a kétértékű forgástengelyek szögfelezőjében elhelyezett, az  $n$ -edrendű forgástengelyen átmenő tükörsíkokat tartalmazza,
6.  $T_d$ : a szabályos tetraéder összes szimmetriaelemét tartalmazza,
7.  $T_h$ :  $T$  szimmetriaelemein kívül az inverziót tartalmazza,
8.  $O_h$ : a kocka összes szimmetriaelemét tartalmazza,
9.  $Y_h$ : a szabályos ötszögű dodekaéder összes szimmetriaelemét tartalmazza.

b) *Bravais-rács, kristályrendszerek*

A későbbiekben ideális kristályos anyagban lejátszódó jelenségeket fogunk vizsgálni. A kristályokat az jellemzi, hogy található három olyan, nem egy síkban fekvő  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  és  $\mathbf{a}_3$  vektor (ezeket úgy választjuk, hogy az általuk kifeszített paralelepipedon térfogata minimális legyen), hogy tetszőleges egész számból álló  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $m_3$  számhármast véve és a kristályt a  $\mathbf{t} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$  vektorral eltolva, annak minden pontja önmagával ekvivalens pontba menjen át. A  $\mathbf{t}$  vektorok végpontjai által kifeszített rácsot nevezzük Bravais-rácsnak. A Bravais-rácsot önmagába vivő forgások és tükrözések alkotják a Bravais-rács homogén szimmetriacsoportját.

Az  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$  vektorokkal kifeszített elemi cella általában nem rendelkezik a Bravais-rács szimmetriájával. Mindig lehet olyan, az elemi cellánál esetleg nagyobb cellát választani, mely már rendelkezik ezzel a szimmetriával. Ezt nevezzük Bravais-cellának.

A Bravais-rács szimmetriacsoportja a pontcsoportok valamelyikével egyezik meg. A pontcsoportok véges alakzatok szimmetriáját írják le, a Bravais-rács rács-pontjai pedig az egész teret betöltik, ezért nem felel meg minden pontcsoportnak egy Bravais-rács. Csak 2, 3, 4 és 6 értékű forgástengelyek szerepelhetnek. A  $\mathbf{t}$  vektorral együtt a  $-\mathbf{t}$  vektor is ad egy rácspontot, ezért a Bravais-rács szimmetriacsoportjában az inverzióknak szerepelnie kell. Könnyen belátható, hogy egy Bravais-rács szimmetriacsoportjának a  $C_n$  alcsoporttal együtt a  $C_{nv}$  alcsoportot is tartalmaznia kell  $n > 2$  esetén. A pontcsoportok közül csak 7 tesz eleget ezeknek a kikötéseknek:

$$S_2, C_{2h}, D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, O_h \quad (\text{I. 1.1})$$

Ezeket nevezzük kristályrendszereknek vagy szingóniáknak.

Az azonos szingóniához tartozó Bravais-rácsok között is tehetünk megkülönböztetést. Két Bravais-rácsot azonos típusúnak nevezzük, ha a rácsponthelyének folytonos deformálásával egymásba átvihetők oly módon, hogy közben a szimmetriacsoport ne változzék. Így 14 típust lehet megkülönböztetni, ezeket szokás Bravais-rácsként emlegetni. Egy szingónián belül a típusok abban különböznek, hogy az  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$  alapvektorok más és más ortogonalitási feltételnek tesznek eleget. A függékben adjuk meg a 14 Bravais-rács típust.

c) *Kristályosztályok és tércsoportok*

A Bravais-rács szimmetriájának vizsgálatakor elfeledkeztünk az elemi cellában az atomok elhelyezkedéséről és a csúcspontokat geometriai pontokként tekinthettük. A fizikai tulajdonságok szempontjából azonban lényeges, hogy az elemi cella hogyan van kitöltve a különböző atomokkal vagy atomcsoportokkal. Makroszkopikus szempontból az érdekes, hogy különböző irányokhoz viszonyítva milyen az atomok elhelyezkedése. A kristály iránycsoportját azok a forgatásos és tükrözéses elemek



alkotják, melyek a kristályban minden irányt önmagával ekvivalens irányba visznek át. Az iránycsoport elemeinek benne kell lenniök a Bravais-rács szimmetriacsoportjának elemei között, de nem kell annak minden elemét tartalmaznia és ezért annyi iránycsoport lehetséges, ahány alcsoportot lehet kiválasztani a 7 szingóniából. Összesen 32 iránycsoportot kapunk, mégpedig

triklin:  $E, S_2$ ,  
 monoklin:  $C_{0h}, C_2, C_{2h}$ ,  
 ortorombos:  $C_{2v}, D_2, D_{2h}$ ,  
 tetragonális:  $S_4, D_{2d}, C_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{4h}$ ,  
 romboéderes:  $C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d}$ ,  
 hexagonális:  $D_6, D_{6h}, C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d}, C_{3h}, D_{3h}, C_6, C_{6h}, C_{6v}$ ,  
 köbös:  $T, T_h, T_d, O, O_h$ .

Romboéderes Bravais-cellánál ugyanazok az iránycsoportok lehetségesek, mint hexagonális Bravais-cellánál, ezért van látszólag több mint 32 iránycsoport.

A kristályokat iránycsoportjuk szerint osztályozva az azonos iránycsoporttal rendelkezőket egy kristályosztályba tartozóknak nevezzük. A 32 iránycsoportnak megfelelően 32 kristályosztály létezik.

A kristályok összes szimmetriaelemét vizsgálva ezek között szerepelnek a tiszta translációk, továbbá lehetséges forgatás, tükrözés, inverzió vagy ezek valamelyikének és egy nem egész rácsvektorral való eltolásnak az egymásutánja. Ezeket az elemeket  $\{t_{\alpha_i} | h_i\}$ -vel jelöljük, ahol  $h_i$  tiszta forgatás, tükrözés, vagy inverzió,  $t_{\alpha_i}$  pedig  $\alpha_i$  vektorral való eltolás. A szimmetriaelemek összes lehetséges kombinációjával 230 tércsoportot lehet előállítani. A tércsoport  $\{t_{\alpha_i} | h_i\}$  alakú elemeiből az iránycsoport elemeit a  $t_{\alpha_i}$  translációk elhagyásával kapjuk és ezért a tércsoportok jelölésére a kristályosztály jelét használhatjuk, melyet még egy felső indexszel látunk el. A tércsoportok egy másik fajta jelölésénél azt tüntetik fel, hogy milyen szimmetriaműveletek fordulnak elő. A tércsoportok részletes leírása néhány csoportelméleti [8] és krisztallográfiai [9] könyvben megtalálható.

#### d) Tércsoportok irreducibilis ábrázolásai

A kristályt önmagába vivő translációk csoportja a tércsoportnak egy alcsoportja és először ennek az irreducibilis ábrázolásait nézzük.

A translációs csoport Abel-féle csoport, irreducibilis ábrázolásai egydimenziósak. Az  $\mathbf{a}_i$  vektorral való eltolás jelentsen  $\Theta_i$ -vel való szorzást, vagyis

$$D' \{ \mathbf{a}_i | e \} = \Theta_i. \quad (\text{I. 1.2})$$

$D$  akkor adja a translációs alcsoport ábrázolását, ha

$$D' \{ \mathbf{R}_n | e \} D' \{ \mathbf{R}_m | e \} = D' \{ \mathbf{R}_n + \mathbf{R}_m | e \}. \quad (\text{I. 1.3})$$

Egy  $\mathbf{t} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3$  vektorral való eltolásnál akkor

$$D' \{ \mathbf{t} | e \} = \Theta_1^{m_1} \cdot \Theta_2^{m_2} \cdot \Theta_3^{m_3}. \quad (\text{I. 1.4})$$

Az ábrázolás uniter lesz, ha  $|\Theta_i|^0 = 1$ , Válasszuk  $\Theta_i$ -t  $\Theta_i = \exp(-ik_i)$  alakban. (I. 1.4) alapján akkor

$$D \{ \mathbf{t} | e \} = e^{-ikt} \quad \text{ahol} \quad \mathbf{kt} = k_1 m_1 + k_2 m_2 + k_3 m_3 \quad (\text{I. 1.5})$$



Az (I. 1.4) és (I. 1.5) egyenleteket  $\mathbf{k}$ -ra megoldva

$$\mathbf{k} = \frac{-1}{2\pi i} \sum_{i=1}^3 \mathbf{b}_i \ln \Theta_i + \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{b}_i \quad (\text{I. 1.6})$$

ahol  $n_i$  tetszőleges egész szám,

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3)}.$$

$\Theta_i$  pedig az egységkör egy pontja. A  $\mathbf{b}_i$  vektorokat nevezzük a reciprokrács alapvektorainak. Az egész számú reciprokrács vektorban különböző  $\mathbf{k}$  vektorokat ekvivalenseknek nevezzük. A reciprok térben kiválaszthatunk egy olyan tartományt, mely az ekvivalens  $\mathbf{k}$  vektorok közül csak a legrövidebbet tartalmazza. Ez a tartomány a Brillouin-zóna.

A translációs csoport irreducibilis ábrázolásai tehát (I. 1.5) alakban adhatók meg és egy Brillouin-zónabeli  $\mathbf{k}$  vektorral jellemezhetők. Kiválasztva egy  $\mathbf{k}_1$  vektort és egy  $\Phi_1$  függvényt, mely translációnál  $\mathbf{k}_1$  szerint transzformálódik, hattassuk  $\Phi_1$ -re a tércsoport forgatásos elemeit és nézzük az így kapott  $D\{t_i|h_i\}\Phi_1$  függvények translációs tulajdonságait. Ez a függvény a  $h_i\mathbf{k}_1$  vektor szerint fog transzformálódni. Innen következik, hogy a tércsoport irreducibilis ábrázolásaiban olyan  $\mathbf{k}$  vektorok szerint transzformálódó függvények keveredhetnek, melyek egymásból a kristályosztály elemeivel előállíthatók. Az ily módon kapott  $\mathbf{k}$  vektorok adják a tércsoport ábrázolásának csillagát. A csillag egy vektorát elég mindig megadni, mert a kristályosztály ismeretében a többi előállítható.

Válasszuk ki a tércsoport forgatásos elemeiből azokat, melyek a kiszemelt  $\mathbf{k}_1$  vektort önmagába vagy azzal ekvivalensbe viszik át. Ezek alkotják a  $\mathbf{k}_1$  vektor  $G_{\mathbf{k}_1}$  kis-csoportját. Tegyük fel, hogy ismerjük a kis-csoport irreducibilis ábrázolásait. Megmutatjuk, hogy akkor ezekből a teljes tércsoport irreducibilis ábrázolásai határozhatók meg [8].

A  $\mathbf{k}_1$  vektor kis-csoportja tartalmazza a  $g_1^{(1)}, g_2^{(1)}, \dots, g_n^{(1)}$  elemeket. A kis-csoport  $m$  irreducibilis ábrázolását jelölje  $\tau^{(k_1, m)}(g_i^{(1)})$ , az ábrázolás  $\mu$  bázisfüggvényét pedig  $\Phi_\mu^{(1)}$ . A  $\Phi$  függvényeket is el kellene látni  $(k_1, m)$  indexszel, ezt azonban itt most elhagyjuk. Feltevésünk szerint a  $\tau^{(k_1, m)}(g_i^{(1)})$  ábrázolás  $\tau_{\mu\nu}^{(k_1, m)}(g_i^{(1)})$  mátrix-elemeit ismerjük. Válasszunk ezután olyan  $g_1^{(2)}, g_1^{(3)}, \dots, g_1^{(s)}$  tércsoportelemeket, melyek a  $\mathbf{k}_1$  vektorból az ábrázolás csillagának többi  $\mathbf{k}_2 = g_1^{(2)}\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3 = g_1^{(3)}\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_s = g_1^{(s)}\mathbf{k}_1$  vektorát állítják elő. Defináljuk ezután a

$$\Phi_\mu^{(p)}(\mathbf{r}) = T(g_1^{(p)})\Phi_\mu^{(1)}(\mathbf{r}) = \Phi_\mu^{(1)}[(g_1^{(p)})^{-1}\mathbf{r}] \quad (\text{I. 1.7})$$

$$\mu = 1, 2, \dots$$

$$p = 1, 2, \dots$$

függvényeket. Állításunk az, hogy ezek a függvények már a tércsoport ábrázolásának bázisfüggvényeit alkotják.

Vizsgáljuk a tércsoport egy tetszőleges  $g$  elemének hatását a  $\Phi_\mu^{(p)}$  függvényre.



A  $\mathbf{k}_p = g_1^{(p)} \mathbf{k}_1$  vektort a  $g$  elem vigye át  $\mathbf{k}_h = g_1^{(h)} \mathbf{k}_1 = g \mathbf{k}_p$ -be. Könnyű belátni, hogy akkor a  $g_0^{(1)} = (g_1^{(h)})^{-1} g g_1^{(p)}$  elem a  $G_{k_1}$  kis-csoportba tartozik, hiszen

$$g_0^{(1)} \mathbf{k}_1 = (g_0^{(h)})^{-1} g g_1^{(p)} \mathbf{k}_1 = (g_0^{(h)})^{-1} g \mathbf{k}_p = (g_0^{(h)})^{-1} \mathbf{k}_h = \mathbf{k}_1 \quad (\text{I. 1.8})$$

Ekkor viszont  $g^{-1} g = g_1^{(h)} g_0^{(1)} (g_1^{(p)})^{-1}$  alakban írva

$$T(g) \Phi_\mu^{(p)} = T(g_1^{(h)}) T(g_0^{(1)}) T[(g_1^{(p)})^{-1}] \Phi_\mu^{(p)} = T(g_1^{(h)}) T(g_0^{(1)}) \Phi_\mu^{(1)}$$

A  $\mathbf{k}_1$  vektor szerint transzformálódó altérben  $T(g_0^{(1)})$ -nak a  $\tau^{(k_1, m)}(g_0^{(1)})$  irreducibilis kis-csoport-ábrázolást véve a kapott ábrázolás legyen  $T^{(k_1, m)}$ .

$$T^{(k_1, m)}(g) \Phi_\mu^{(p)} = T(g_1^{(h)}) \tau_{\nu\mu}^{(k_1, m)}(g_0^{(1)}) \Phi_\nu^{(1)} = \tau_{\nu\mu}^{(k_1, m)}(g_0^{(1)}) \Phi_\nu^{(h)} \quad (\text{I. 1.9})$$

Az (I. 1.7)-ben megadott  $\Phi_\mu^p$  függvényekben valóban ábrázolódik a tércsoport. Könnyű belátni, hogy ha  $\tau^{(k_1, m)}$  irreducibilis ábrázolás, akkor a  $T^{(k, m)}$  ábrázolás is irreducibilis és a tércsoport minden irreducibilis ábrázolása előállítható ily módon [8].

A  $G_{k_1}$  kis-csoport irreducibilis ábrázolásainak előállításával itt nem foglalkozunk, mert ezek mind a 230 tércsoportéhoz, azok mindenfajta  $\mathbf{k}$  vektorához megtalálhatók Kovaljev [10] könyvében. Lényeges megjegyezni, hogy nem közvetlenül a kis-ábrázolások vannak táblázatba gyűjtve, hanem az ún. súlyozott kis-ábrázolások. A kettő akkor különbözik egymástól, ha a szimmetriaelemek között csavartengely vagy csúszósík is előfordul.  $\{\mathbf{v}|h\}$ -val jelölve egy ilyen elemet és  $\tau^{(k)}\{\mathbf{v}|h\}$ -val az ehhez az elemhez tartozó mátrixot, a súlyozott ábrázolás mátrixát a következőképpen definiáljuk

$$\hat{\tau}^{(k)}(h) = \tau^{(k)}\{\mathbf{v}|h\} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{v}} \quad (\text{I. 1.10})$$

A súlyozott ábrázolás ismeretében tehát (I. 1.10) alapján meghatározhatjuk a  $\mathbf{k}$  vektor kis-csoportjának irreducibilis ábrázolásait, majd a fent leírt módon a teljes tércsoport irreducibilis ábrázolásait is.

## II. A másodrendű fázisátalakulások Landau-féle elmélete

### 1. Az első- és másodrendű fázisátalakulások jellemzése

A természetben két különböző termodinamikai fázis egymásba történő átalakulása kétféle módon mehet végbe. Az egyik esetben az átalakulási pont a két egyensúlyban levő fázis termodinamikai potenciálja megegyezik ugyan, de entrópiája különböző, és ennek következtében ez a fajta fázisátalakulás mindig hőfelvétellel vagy hőleadással (latens hővel) jár együtt. Az ilyen típusú fázisátalakulást nevezzük elsőrendű fázisátalakulásnak. Az elsőrendű fázisátalakulásokra jellemző, hogy a két koegzisztáló fázis egymástól lényegesen különböző makroszkopikus tulajdonságokkal rendelkezik. Igen gyakran az átalakulás nem akkor történik meg, amikor a két fázis termodinamikai potenciálja megegyezik, hanem alacsonyabb vagy magasabb hőmérsékleten, mert egy energiagát akadályozza az átalakulást. Ez a hiszterézis jelensége.

A fázisátalakulások egy másik típusánál nemcsak a termodinamikai potenciál, hanem az entrópia is és minden termodinamikai állapotjelző folyamatosan változik az átalakulás során, de az egyik fázisban megjelenik valamilyen új tulajdonság,



mely a fázist az előzőtől megkülönbözteti. Ezeket a fázisátalakulásokat nevezzük másodrendű fázisátalakulásnak. Ezeknél az átalakulásoknál mindig található egy olyan rendparaméternek nevezhető  $\eta$  mennyiség, mely az egyik fázisban zérus értékű, a másikban zérustól különböző, de az átalakulási pontban folytonos a változás. A két fázist a rendparaméter értékének nulla vagy nem nulla volta különbözteti meg.

Az elsőrendű fázisátalakulások tipikus példája a folyadék-gáz átalakulás, az antiferromágneses-ferromágneses átalakulások. Másodrendű fázisátalakulás az ötvözetrendeződések egy része, egyes paramágneses-mágneses fázisátalakulások (a mágnesezettség vagy alrácsmágnesezettség vehető rendparaméternek), a normál fém-szupravezető átmenet mágneses tér nélküli esetben (itt a rendparaméter az energiahelyettesítő) és a hélium szuperfolyékony állapotba való átmenete (rendparaméter a Bose-kondenzátum mennyisége).

## 2. A másodrendű fázisátalakulások Landau-féle termodinamikai elmélete

Az elsőrendű fázisátalakulásokra nincs általános elmélet, ezzel szemben a másodrendű fázisátalakulásokra Landau [11] dolgozott ki egy egységes elméletet, mely első közelítésben a tapasztalatnak megfelelően írja le a jelenségeket. Az első közelítés kifejezés itt arra utal, hogy éppen a fázisátalakulási pont közvetlen közelében az elmélet alkalmazhatóságával problémák vannak. Erre majd a későbbiekben visszatérünk.

A Landau-elméletben a döntő lépés annak a felismerése volt, hogy minden másodrendű fázisátalakuláshoz létezik egy rendparaméter, mely az egyik fázisban zérus értékű, a másikban pedig kis értékeket vesz fel és így sorfejtési paraméterként kezelhető. Az alábbiakban az egyszerűbb szóhasználat kedvéért a paramágneses-ferromágneses átalakuláson mutatjuk be az elméletet, de az eredmények a többi átalakulásra is igazak a fogalmak megfelelő cseréjével.

Vizsgáljuk egy izotróp ferromágneses rendszer  $\Phi$  termodinamikai potenciálját mint a  $p$  nyomás, a  $T$  hőmérséklet és az  $M$  mágnesezettség függvényét,  $\Phi(p, T, M)$ -t. Feltételezzük, hogy az átalakulási pont közelében, ahol  $M$  még kicsi,  $\Phi$  sorba fejthető  $M$  hatványai szerint, vagyis

$$\Phi(p, T, M) = \Phi_0 + AM^2 + BM^4 + \dots \quad (\text{II. 2.1})$$

$\Phi_0$ ,  $A$  és  $B$   $p$ -nek és  $T$ -nek folytonos függvénye. Ezzel a feltevessel biztosítjuk a leg egyszerűbben a termodinamikai potenciál folytonos változását. A sorfejtésben csak páros hatványok fordulnak elő, mert a szabad energia invariáns az  $M \rightarrow -M$  cserével szemben. Nem mágneses fázisátalakulásoknál, ahol ilyen érvelés nem használható, a stabilitási feltételekkel mutatható meg a páratlan hatványok eltűnése. Külső  $H$  mágneses tér esetén egy  $-HM$  tagot kell hozzáírni (II. 2.1) kifejezéshez.

A sorfejtés  $A$  és  $B$  együtthatójáról még nem tudunk semmit. Abból a feltevésből határozzuk meg őket, hogy egy  $T$  hőmérséklet fölött, a paramágneses tartományban a  $\Phi$  szabadenergia  $M=0$  esetén minimális, míg  $T_c$  alatt  $M \neq 0$  felel meg  $\Phi$  minimumának és  $M$  folytonosan változik  $T_c$ -ben. Ezek a kikötések akkor teljesülnek, ha  $T_c$  fölött  $A > 0$  és  $B > 0$ ,  $T_c$  alatt pedig  $A < 0$  de  $B > 0$  és  $A$  folytonos függvénye  $T$ -nek, vagyis  $T_c$ -ben  $A(p, T_c) = 0$ .



A legegyszerűbb feltevésnek az kínálkozik, hogy

$$A(p, T) = a(T - T_c), \quad a > 0, \quad (\text{II. 2.2})$$

$B$ -t pedig állandónak vesszük az átalakulás közelében.

Határozzuk meg a mágnesezettség hőmérsékletfüggését  $T_c$  alatt mágneses tér jelenléte nélkül. (II. 2.1) minimalizálásával

$$\frac{\partial \Phi}{\partial M} = 2AM + 4BM^3 = 0$$

$$M^2 = -\frac{A}{2B} = \frac{a}{2B} \cdot (T_c - T) \quad (\text{II. 2.3})$$

$$M \sim \sqrt{T_c - T} \quad (\text{II. 2.4})$$

A mágnesezettség  $T_c - T$  négyzetgyökével arányos.

A szuszceptibilitást is meghatározhatjuk, ha a  $-HM$  energijárulékot is figyelembe vesszük. Ekkor ugyanis

$$\frac{\partial \Phi}{\partial M} = 2AM + 4BM^3 - H = 0,$$

a szuszceptibilitásra vonatkozó egyenlet pedig

$$2A\chi + 12BM^2\chi = 1 \quad (\text{II. 2.5})$$

A paramágneses tartományban  $M=0$  és így

$$\chi = \frac{1}{2A} = \frac{1}{2a(T - T_c)}, \quad \text{ha } T > T_c. \quad (\text{II. 2.6})$$

A szokásos Curie—Weiss-törvény adódik a szuszceptibilitásra.  $T_c$  alatt (II. 2.3) felhasználásával kapjuk, hogy

$$\chi = \frac{-1}{4A} = \frac{1}{4a(T_c - T)}, \quad \text{ha } T < T_c. \quad (\text{II. 2.7})$$

Végül meghatározhatjuk a fajhő viselkedését a fázisátalakulás során. (II. 2.3)-t (II. 2.1)-be behelyettesítve

$$\Phi = \begin{cases} \Phi_0 & \text{ha } T > T_c \\ \Phi_0 - \frac{a^2(T - T_c)^2}{4B} & \text{ha } T < T_c \end{cases}$$

Ebből fajhő:

$$C_p = \begin{cases} C_{p0} & \text{ha } T > T_c \\ C_{p0} + \frac{a^2 T}{2B} & \text{ha } T < T_c \end{cases} \quad (\text{II. 2.8})$$



A ferromágneses fázisban a fajhő  $\frac{a^2 T_c}{2B}$ -vel, egy véges értékkel nagyobb, mint a paramágneses fázisban.

A fent kapott eredmények megegyeznek az effektív tér vagy molekuláris tér közelítésben kapott eredményekkel. Bizonyos kísérleti eredmények értelmezésére ez az elmélet valóban elegendő, a fázisátalakulási pont közvetlen környezetében viszont a kísérletek ettől eltérő viselkedést adnak. Ez annak a következménye, hogy elfeledkeztünk a tárgyalás során a fluktuációkról, melyek igen lényegessé válnak  $T_c$  közelében. Ekkor már nem jogos egy helytől független  $M$  függvénnyel dolgozni, és  $M$  gradiensét tartalmazó tagok is beírandók  $\Phi$  sorfejtésébe. *Ginzburg* [12] vizsgálta az elmélet alkalmazhatósági feltételét és azt találta, hogy mágneses anyagoknál várhatóan  $|T - T_c|/T_c < 10^{-3}$  tartományon belül lesz jelentős a fluktuációk szerepe. A termodinamikai mennyiségek hőmérsékletfüggése egészen más lesz, mint amit a fentiek alapján várunk. Ennek a problémának a részleteibe itt nem megyünk bele, mert túl messzire vezetne. Minket elsősorban ugyanis a fázisátalakulás során bekövetkező szimmetriaváltozások érdekelnek és fel fogjuk tételezni, hogy bár a (II. 2.1) típusú sorfejtés  $T_c$  közvetlen közelében nem jogos, az ily módon meghatározott, új szimmetriával rendelkező fázis  $T_c$  közvetlen környezetében is ezzel a szimmetriával rendelkezik.

### 3. A szimmetria változása másodrendű fázisátalakulásnál

A másodrendű fázisátalakulások Landau-féle elméletében igen fontos volt annak a felismerése, hogy az átalakulás során a rendszer termodinamikai jellemzői ugyan folytonosan változnak, de a rendparaméter zérustól különböző értékével együtt valamiféle ugrásszerű változás történik. Mágneses fázisátalakulásoknál ez az ugrásszerű változás a mágneses szimmetria megváltozását jelenti. Az ötvözet-rendeződésnél is szimmetriaváltozás jön létre, sőt általános szóhasználatlalt, a szupervezető és szuperfolyékony átalakulást is ide értve, mondhatjuk, hogy a rendparaméter nem zérus értéke egy új szimmetriájú fázis jelenlétét mutatja. Bizonyos elsőrendű fázisátalakulások is szimmetriaváltozással járnak, mint pl. az antiferromágneses-ferromágneses átalakulás. Lényeges különbség viszont az, hogy míg az elsőrendű fázisátalakulásoknál semmit sem mondhatunk arról, hogy egy adott szimmetriájú szerkezetből az átalakulás során milyen szimmetriájú szerkezet keletkezik, addig a másodrendű fázisátalakulásoknál a Landau-elmélet segítségével meghatározhatjuk, hogy milyen szimmetriájú szerkezetek alakulhatnak ki.

A Landau-elméletet *Lifsic* [13] alkalmazta rendeződő ötvözetek esetén a rendezett fázis szimmetriájának meghatározására. A mágneses fázisátalakulásokra *Dzjalosinszkij* [14] alkalmazta először az elméletet, részletesen viszont *Kovaljev* [15] írta le a módszert.

Az ötvözetrendeződéshez képest a mágneses fázisátalakulásoknál lényeges különbség, hogy a rendparaméter, a mágnesezettség vektormennyiség. Ez teszi lehetővé nem kollineáris mágneses szerkezetek leírását (pl. csavarszerkezet, gyenge ferromágnesesség). Ugyancsak ezzel kapcsolatos a később tárgyalandó kvázi-fázisátalakulás is.

A paramágneses-mágneses fázisátalakulásokat fogjuk vizsgálni *Kovaljev* nyomán [15] és azt kívánjuk meghatározni, hogy egy adott szimmetriával rendelkező para-



mágneses kristályból a fázisátalakulás folytán  $T_c$  alatt milyen mágneses szerkezetek alakulhatnak ki.

A kristály mágneses szerkezetét egy  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  sűrűségfüggvénnyel írhatjuk le, mely az  $\mathbf{R}_i$  rácspontokban lokalizált  $\mathbf{M}_{\mathbf{R}_i}$  momentumok esetén

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_i} \mathbf{M}_{\mathbf{R}_i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$

alakban adható meg. Komponensekre kiírva

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} M_{\alpha}(\mathbf{r}), \quad (\text{II. 3.1})$$

ahol  $\mathbf{e}_{\alpha}$  ( $\alpha = x, y, z$ ) az  $\alpha$  irányú axiálvektor. A mágneses momentum axiálvektor jellege azt jelenti, hogy inverzió esetén a momentum nem vált előjelet, síkra való tükrözésénél a síkra merőleges komponens változatlan marad, míg a síkkal párhuzamos komponens előjelet vált. Forgatásoknál viszont közöséges vektorként viselkedik. A legegyszerűbben ezt úgy látjuk be, hogyha arra gondolunk, hogy a mágneses momentum irányára merőleges síkba folyó köráramtól származhat a momentum.

Jelöljük  $G$ -vel a kristály tércsoportját, vagyis azokat a szimmetriaműveleteket, melyek a kristályt önmagába viszik át. Jelölje  $R$  az időtükrözés műveletét,  $R$  alkalmazásakor a rendszerben folyó áramok és így a mágneses momentumok is váltsanak előjelet. A paramágneses fázisban, ahol nincs az atomokon eredő momentum,  $R$  nyilvánvalóan szimmetriaművelet, és ezért a paramágneses fázisban a mágneses tércsoport  $G$  és  $R$  direkt szorzata,  $G \otimes R$ .  $T_c$  alatt, a mágneses fázisban  $R$  már nem lesz szimmetriaművelet, és esetleg még egyéb, a  $G \otimes R$ -ben szereplő művelet is hiányozni fog a mágneses fázis szimmetriaműveletei közül. A mágneses fázis szimmetriacsoporthoz mindig  $G \otimes R$  alcsoportjaiból fog kikerülni.

Az irreducibilis ábrázolásokra vonatkozó teljességi tétel szerint [8] az  $M_{\alpha}(\mathbf{r})$  függvényeket kifejezhetjük a  $G \otimes R$  tércsoport irreducibilis ábrázolásainak bázisfüggvényei szerint:

$$M_{\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_i c_{\alpha i} \Phi_i(\mathbf{r}) \quad (\text{II. 3.2})$$

Az  $i$  index itt összevontan jelenti az ábrázolás csillagának egy vektorát, a csillagon belül egy irreducibilis ábrázolást és ezen túl az ábrázolásban a bázisfüggvény sorszámát.

Mivel a mágneses momentum valós, a nem valós ábrázolásoknak a konjugált ábrázolással együtt kell szerepelniök, mégpedig komplex-konjugált együtthatókkal.

A  $G$  tércsoport irreducibilis ábrázolásai ismeretében könnyen megkaphatjuk  $G \otimes R$  irreducibilis ábrázolásait. Mivel az  $R$  csoport két elemet tartalmaz, az  $E$  egységelemet és  $R$ -et, ezért ennek a csoportnak két egydimenziós ábrázolása van:  $E=1$ ,  $R=1$ , ill.  $E=1$ ,  $R=-1$ .  $G$  minden  $T$  ábrázolásából a  $G \otimes R$  csoporthoz két ábrázolást készítettünk, melyek  $R$ -rel szemben párosok, ill. páratlanok lesznek. Jelölésük  $T_g$ , ill.  $T_u$ . A páros ábrázolásra  $T_g(h) = T_g(Rh) = T(h)$ , a páratlanra  $T_u(h) = -T_u(Rh) = T(h)$ . Mivel a mágneses momentum páratlan az időtükrözéssel szemben, a (II. 3.2) sorfejtésben csak a páratlan ábrázoláshoz tartozó bázisfüggvények fordulhatnak elő.

További megszorítást is tehetünk a (II. 3.2)-ben előforduló ábrázolásokra. Vannak ugyanis olyan ábrázolások, melyek bázisfüggvényei nem adnak az atomok



helyén zérustól különböző mágneses sűrűséget és így nem alkalmasak lokalizált momentum leírására. *Kovaljev* [15] adott egy feltételt az ilyen ábrázolások kiszűrésére. Annak meghatározására, hogy a tércsoport egy  $T^{(k,m)}$  ábrázolása leírhat-e mágneses momentumot egy  $\mathbf{B}$  helyvektori  $A$  atomon, a következőképpen járunk el. Válasszuk ki a kristály  $\hat{G}$  pontcsoportjának  $h$  elemei közül azokat, melyek a kristályt önmagába viszik át, ha a forgatásokat az illető atomon átmenő tengely körül, a tükrözéseket pedig az atomra illeszkedő síkon végezzük el. A  $h$  szimmetriaelemnek megfelelő műveletet az új koordináta-rendszerben  $h'$ -nek nevezzük, mely a régi koordináta-rendszerben

$$h' = \{\mathbf{B} - h\mathbf{B}|h\} \quad (\text{II. 3.3})$$

alakban adható meg. A  $h'$  szimmetriaműveletek alkotják a  $\hat{G}'$  pontcsoportot, mely az elemi cella különböző atomjaira különböző lehet. A *Kovaljev* által megadott feltétel azt mondja ki, hogy a  $T^{(k,m)}$  ábrázolás bázisfüggvényei akkor adnak zérus momentumot egy  $A$  atom helyén, ha az  $A$  atomhoz tartozó  $\hat{G}'(A)$  pontcsoport  $h'$  elemeire meghatározott  $\chi^{(k,m)}(h')$  karakterek a

$$\sum_{\hat{G}'(A)} \chi^{(k,m)}(h') = 0 \quad (\text{II. 3.4})$$

egyenletnek tesznek eleget. Az elemi cella minden atomjára meghatározva a  $\hat{G}'$  pontcsoportot és a karaktereket, azok az ábrázolások, melyekre

$$\sum_{\hat{G}'(A)} \chi^{(k,m)}(h') = \sum_{\hat{G}'(B)} \chi^{(k,m)}(h') = \dots = 0 \quad (\text{II. 3.5})$$

egyáltalán nem adnak mágneses szerkezetet és ezért kihagyhatók a (II. 3.2) sorfejtésből. A tétel bizonyítását és  $\chi^{(k,m)}(h')$  meghatározásának módját a függelék 2. és 3. pontjában közöljük.

Nem mágneses fázisátalakulásoknál még két feltétel van, mely korlátozza a (II. 3.2) kifejtésben előforduló irreducibilis ábrázolásokat. Az egyik feltétel az, hogy a sorfejtés  $c_i$  együtthatóiból ne lehessen harmadrendű invariánst képezni. Látni fogjuk, hogy a  $\Phi$  szabadenergiát a  $c_i$  együtthatókból felépített invariáns kifejezésekkel adhatjuk meg és itt azt követeljük meg, hogy harmadrendű invariáns ne szerepelhessen, mert jelenléte instabilitáshoz vezetne. Mágneses fázisátalakulásoknál ez a feltétel automatikusan kielégül, mert az  $R$  időtükrözés figyelembevétele miatt csak párosrendű invariánsok léteznek.

További korlátozást jelent az a követelmény, hogy a fázisátalakulás során létrejövő szerkezet is legyen kristályszerkezet, vagyis legyen periodikus. Ez az ábrázolásra jellemző  $\mathbf{k}$  vektorra jelent megszorítást, hiszen ez adja meg a translációs tulajdonságot. A mágneses szerkezetnél erről megint elfeledkezhetünk, hiszen hosszú hullámhosszú csavarszerkezeteknél éppen a szokásos értelemben vett periodicitás szűnik meg. Megemlítjük [8], hogy ha a csavarszerkezetektől eltekintünk, akkor olyan megszorítást kapunk, hogy a  $\mathbf{k}=0$  vektoron kívül csak a paramágneses fázis-hoz tartozó Brillouin-zóna határán fekvő vektorhoz tartozó ábrázolások írhatnak le mágneses szerkezetet. Ilyenkor a mágneses cella legfeljebb néhányszorosa lehet a kémiai elemi cellának. A legtöbb esetben egy, két vagy három irányban duplázódik meg a cella hosszmerete.

Az alkalmazásoknál, a lehetséges mágneses szerkezetek meghatározásánál a mágneses cella méretét többnyire a mérésből adottnak vesszük és így a translációs



tulajdonság alapján ismerjük a szerkezet leírásához szükséges  $\mathbf{k}$  vektort. A feladat a cellán belül a mágneses momentum eloszlásának meghatározása lesz.

A fentiek alapján meghatározva, hogy milyen  $T^{(k,m)}$  ábrázolások szerint transzformálódó  $\Phi_\mu^{(k,m)}(\mathbf{r})$  függvények fordulhatnak elő  $M_x(\mathbf{r})$  kifejtésében, vizsgáljuk tovább  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ -t. (III. 3.2)-t (II. 3.1)-be beírva

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{i,z} c_{zi} \mathbf{e}_z \Phi_i(\mathbf{r}). \quad (\text{II. 3.6})$$

Egy  $h$  szimmetriaműveletet végezve  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ -en, nemcsak a  $\Phi_i(\mathbf{r})$  függvények transzformálódnak, hanem az  $\mathbf{e}_z$  axiálvektorok is, mégpedig a  $V(h)$  axiálvektor ábrázolás szerint. Az  $\mathbf{e}_z \Phi_i$  kifejezés tehát a  $V(h)$  axiálvektor ábrázolás és a  $T^{(k,m)}(h)$  ábrázolás direkt szorzataként transzformálódik. A  $V \otimes T^{(k,m)}$  direkt szorzat ábrázolás általában a  $G$  csoportnak reducibilis ábrázolása lehet. Elvégezve a kiredukálást, az  $\mathbf{e}_z \Phi_i$  bázisfüggvényekből  $\Psi_j(\mathbf{r})$  új bázisfüggvényeket nyerhetünk, melyek segítségével a mágneses momentum sűrűség

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_j c_j \Psi_j(\mathbf{r}) \quad (\text{II. 3.7})$$

alakban írható. A  $j$  index itt az irreducibilis ábrázolásra jellemző  $\mathbf{k}$  és  $m$  indexen és a bázisfüggvény sorszámára jellemző  $\mu$  indexen kívül még egy egyéb indexet is jelölhet összefoglalóan, mert a kiredukálás során ugyanaz az ábrázolás többször is előfordulhat. Ez utóbbi ténynek a kvázi-fázisátalakulás tárgyalásánál lényeges szerepe lesz, most azonban elfeledkezhetünk erről.

A (II. 3.7) kifejezést vizsgálva azt is mondhatjuk, hogy nem a  $\Psi_j$  függvények transzformálódnak egy irreducibilis ábrázolás szerint, hanem a  $c_j$  együtthatók, hiszen  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  transzformációja szempontjából mindegy, hogy  $\Psi_j$ -t vagy  $c_j$ -t transzformáljuk. Ha a  $\Psi_j$ -k transzformációját megadó egyenlet

$$T(g) \Psi_j = \sum_k T_{kj}(g) \Psi_k \quad (\text{II. 3.8})$$

volt, akkor  $c_j$ -k transzformációja:

$$T(g) c_j = \sum_k T_{jk}(g) c_k. \quad (\text{II. 3.9})$$

Ezen előkészítés után rátérhetünk eredeti problémánkra, a fázisátalakulás során kialakuló mágneses szerkezet meghatározására. A gondolatmenet részben hasonló lesz a termodinamikai tulajdonságok vizsgálatánál követett gondolatmenethez. Itt is abból indulunk ki, hogy rögzített nyomás és hőmérséklet esetén a termodinamikai rendszer egyensúlyi állapotában a szabadenergia minimális. Ezt azt jelenti, hogy az  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  mennyiséget úgy kell megválasztanunk, hogy  $\Phi = \Phi(p, T, \mathbf{M}(\mathbf{r}))$  minimális legyen. A fázisátalakulási pont közelében  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  kicsi, és feltesszük, hogy  $\Phi$  sorbafejthető  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  szerint.

$$\Phi(p, T, \mathbf{M}(\mathbf{r})) = \Phi_0(p, T, 0) + \Phi_1(p, T, \mathbf{M}(\mathbf{r})) + \Phi_2(p, T, \mathbf{M}(\mathbf{r})) + \dots, \quad (\text{II. 3.10})$$



ahol  $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \mathbf{M}(\mathbf{r})$ -ben első-, másod-, illetve magasabbrendű kifejezések. Ez azt jelenti, hogy  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  (II. 3.7) sorfejtésének beírásával

$$\Phi_1(p, T, \mathbf{M}(\mathbf{r})) = \sum_j c_j \Phi_1(p, T, \psi_j(\mathbf{r})) \quad (\text{II. 3.11})$$

$$\Phi_2(p, T, \mathbf{M}(\mathbf{r})) = \sum_{i,j} c_i c_j \Phi_2(p, T, \psi_i(\mathbf{r}), \psi_j(\mathbf{r}))$$

Mivel a szabadenergia nem függ a koordinátarendszer megválasztásától, ezeknek a kifejezéseknek invariánsoknak kell lenniök a  $G$  csoport tetszőleges transzformációja esetén.  $\Phi$  kifejezésében  $c$ -nek csak invariáns kombinációi szerepelhetnek. Amint azt már korábban megjegyeztük, mágneses esetben nincsenek páratlan rendű invariánsok és így a szabadenergia meghatározásához az összes lehetséges másod- és negyedrendű invariáns szükséges. Az átalakulási pont közelében a magasabbrendű invariánsok várhatóan kis járulékot adnak.  $\Phi$ -t az alábbi alakban írhatjuk fel:

$$\Phi = \Phi_0(p, T) + \sum_i A_i(p, T) f_i^{(2)}(c) + \sum_j B_j(p, T) f_j^{(4)}(c) + \dots \quad (\text{II. 3.12})$$

ahol  $f_i^{(2)}(c)$  és  $f_j^{(4)}(c)$  a  $c$ -kből felépíthető másod- és negyedrendű invariánsok. Minden irreducibilis ábrázoláshoz egy másodrendű invariáns tartozik [8]. Negyedrendű invariáns több van és különböző irreducibilis ábrázolásokhoz tartozó  $c$ -k is adhatnak negyedrendű invariánst (két másodrendű invariáns szorzatát vesszük).

A  $T_c$  átalakulási hőmérsékleten és afölött  $\mathbf{M}(\mathbf{r}) \equiv 0$ , vagyis az összes  $c_j$  együtt-ható zérus.  $T_c$  alatt viszont legalábbis egyes  $c_j$ -k nullától különböző értéket vesznek fel. Ezek az értékek akkor felelnek meg a szabadenergia minimumának, ha a paramágneses tartományban az összes  $A_i(p, T)$  és  $B_j(p, T)$  együtt-ható nem negatív,  $T$  alatt viszont valamelyik negatív lesz. Ha az egyik negyedrendű invariáns együtt-hatójával történne ez meg, akkor  $T_c$  alatt egy kis hőmérséklettartományban még  $c_j = 0$  adná a szabadenergia maximumát, majd ugrásszerűen venne fel néhány  $c_j$  nem zérus értéket. Ilyenkor a mágneses momentum nem változna folytonosan, az átalakulás elsőrendű lenne. Ezért mindig feltételezzük, hogy valamelyik  $A_i$  együtt-ható válik negatívvá  $T_c$  alatt. Azok a  $c_j$ -k vesznek fel véges értéket, melyek emellett az  $A_i$  mellett állnak, a többi viszont továbbra is zérus marad, és ezért  $\Phi$  kifejezéséből elhagyhatók. Minthogy minden irreducibilis ábrázolásból egy másodrendű invariáns képezhető, inekvivalens ábrázolásokból viszont nem képezhető vegyes másodrendű invariáns, az egyes irreducibilis ábrázolások külön tárgyalhatók.

Összefoglalva az elmondottakat, a feladat az, hogy a (II. 3.5) feltétel és a mágneses kristály translációs tulajdonsága által megszabott irreducibilis ábrázolásokhoz konstruáljuk meg az összes másod- és negyedrendű invariánst, majd  $\Phi$  minimalizálásával határozzuk meg értéküket. Az így meghatározott  $c$ -ket azután beírva (II. 3.7)-be, megkapjuk a mágneses szerkezetet leíró  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  momentumsűrűséget. Ehhez azonban ismerni kellene a bázisfüggvényeket is. Ezek ismerete hiányában is meg tudjuk határozni az egyes atomokon a mágneses momentum irányát és egymáshoz viszonyított nagyságát. Először is  $c$ -k ismeretében (II. 3.7) alapján kiválasztjuk azokat a szimmetriaműveleteket, melyek  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ -t invariánsul hagyják. Így megkapjuk a kristály mágneses tércsoportját. Ezután a mágneses momentum tény-



leges elhelyezkedését úgy határozhatjuk meg, hogy a cella 1. atomjához  $m_x(1)$  határozatlan együtthatókkal

$$\mathbf{m}(1) = m_x(1)\mathbf{e}_x + m_y(1)\mathbf{e}_y + m_z(1)\mathbf{e}_z \quad (\text{II. 3.13})$$

momentumokat rendelünk, majd a mágneses tércsoport elemeit hatatjuk ezekre az  $\mathbf{m}(1)$ -ekre. Megkövetelve, hogy ezek a transzformációk a mágneses momentum-sűrűségnek szimmetriatranszformációi legyenek, összefüggéseket kapunk az  $m_x(1)$ -ek között. Ezek az egyenletek szabják meg a momentumok relatív nagyságát és a kristálytani tengelyekhez képesti irányát.

Röviden szóljunk most még arról a korábban már említett problémáról, hogy milyen  $\mathbf{k}$  vektorokkal valósulhat meg mágneses szerkezet és mi a csavarszerkezet kialakulásának feltétele. A (II. 3.12) sorfejtésben az  $A_i(p, T)$  együtthatók függenek az ábrázoláshoz tartozó  $\mathbf{k}$  vektortól és feltehetően annak folytonos függvényei.

Véges kristály esetén a  $\mathbf{k}$  vektorok valójában csak diszkrét értékeket vehetnek fel, de olyan sűrűn helyezkednek el a Brillouin-zónán belül, hogy folytonosnak tekintjük a változást.  $A_i$ -t  $\mathbf{k}$  függvényeként vizsgálva olyan  $\mathbf{k}_0$  vektorral alakulhat ki mágneses szerkezet, melynél  $A_i$  lokális minimummal rendelkezik, vagyis  $A_i$ -t  $\mathbf{k}_0$  környezetében sorbafejtve, a sorfejtésben nincs lineáris tag. Ha ugyanis lenne lineáris tag, akkor kicsit más  $\mathbf{k}$  értéknél már hamarabb teljesülhet, hogy  $A$  negatívvá válik és megjelenne egy mágneses szerkezet. Ha a  $\mathbf{k}_0$  vektor kis-csoportja  $c_1, c_s, c_n$  vagy  $c_{nv}$ , vagyis a csoportban nincsenek egymást metsző szimmetriaelemek, akkor megjelenhet lineáris tag, és ezért nem alakul ki általában ilyen szimmetriájú vektorokkal mágneses szerkezet. Ez az oka, hogy általában  $\mathbf{k}=0$ -val vagy a Brillouin-zóna határán fekvő magas szimmetriájú  $\mathbf{k}$  vektorokkal alakul ki mágneses szerkezet. Véletlenszerűen előfordulhat, hogy egy a Brillouin-zóna belsejében levő  $\mathbf{k}_0$  vektornál van  $A_i$ -nek minimuma és ez csavarszerkezet megjelenésére vezet. Az ilyen  $\mathbf{k}_0$  vektorról azonban semmit sem mondhatunk. Dzjalosinszkij [16] mutatott rá arra, hogy bizonyos esetekben a szimmetriamegfontolások segítségével megadható a hosszú hullámhosszú csavarszerkezet létrejöttének magyarázata. Előfordulhat ugyanis olyan speciális helyzet, hogy egy a Brillouin-zóna határán fekvő  $\mathbf{k}_0$  vektor közelében  $A_i$  sorfejtésében megjelenik ugyan egy lineáris tag, de igen kicsi együtthatóval és ezért  $A_i$  minimuma egy a  $\mathbf{k}_0$ -tól kicsit különböző  $\mathbf{k}$  vektornál lesz. Ez egy hosszú hullámhosszú csavarszerkezet kialakulását eredményezi. Ily módon sikerült Dzjalosinszkijnak értelmeznie az  $\text{MnO}_2$  csavarszerkezetét.

### III. A Landau-elmélet alkalmazása mágneses szerkezetek meghatározására

#### 1. Mangán-alapú ötvözetek mágneses szerkezete

A KFKI Szilárdtestfizikai Laboratóriumában néhány éve folyó kutatási téma a mangán-alapú binér és temér ötvözetek mágneses szerkezeteinek és mágneses fázisátalakulásainak vizsgálata [17]. A legtöbb ötvözetben a paramágneses-mágneses fázisok közötti antiferromágneses-antiferromágneses átalakulás is lejátszódik. Az utóbbiak már elsőrendű átalakulások és többnyire a rácsállandó ugrásszerű változásával járnak együtt. A mangánban levő másik fémes komponens koncentrációjának változtatásakor a rácsállandó változásával az átalakulási hőmérséklet változik.



A különböző összetételű rendezett ötvözeteknél más és más mágneses szerkezet valósul meg. Széles hőmérséklettartományban és több koncentrációnál mérve meg lehet határozni a mágneses fázisdiagramot. A neutroindiffrakciós mérésekkel együtt végzett röntgendiffrakciós és mágneses mérések lehetővé tették, hogy egységes képet kapunk a Mn—Pt rendszerről. Első- és másodszomszéd kicserélődési kölcsönhatás feltételezésével az átalakulások is értelmezhetők voltak, legalábbis kvalitatíve. Ennek a részleteibe itt most nem megyünk be. Az alább közölt számolásainkban ugyanis azt a célt tűztük magunk elé, hogy a neutroindiffrakciós mérések kiértékelésének elősegítésére meghatározzuk a kísérletileg vizsgált rendezett fázisokban a másodrendű fázisátalakulással létrejövő mágneses fázis szerkezetét. Az elsőrendű antiferromágneses-antiferromágneses átalakulásokra az elmélet már nem alkalmazható és ezért ilyen módon a további fázisátalakulások során kialakuló szerkezetekről nem tudunk semmit mondani.

A neutroindiffrakciós mérések kiértékelése úgy történik, hogy, felvéve lehetségesnek vélt momentumeloszlásokat, kiszámolják a szórási hatáskeresztmetszetben szereplő ún. szerkezeti faktorokat, és meghatározzák, hogy milyen típusú reflexiók lépnek fel, és mekkora a relatív intenzitásuk, majd ezt összehasonlítják a neutroindiffrakciós képpel. A Landau-féle elmélet abban nyújthat segítséget, hogy nem vaktában kell elkezdni lehetségesnek vélt momentumeloszlásokat keresni, hanem a paramágneses fázis szimmetriájának ismeretében meghatározhatjuk azokat a mágneses szerkezeteket, melyek az elmélet szerint lehetséges szerkezetek, és csak ezeket kell összehasonlítani a kísérlettel. A nem egész indexű reflexiók megjelenéséből általában könnyen meghatározható a mágneses és kémiai elemi cella viszonya, vagyis a translációs szimmetria és ez már lényegesen egyszerűsíti a számolást, mert ismeretes, hogy milyen  $\mathbf{k}$  vektor szerint transzformálódik translációnál a momentumsűrűség.

Az ilyen típusú számolások további előnye, hogy sok esetben a porfelvételtől a momentumoknak a kristálytani tengelyekhez viszonyított iránya nem határozható meg kísérletileg, a szimmetria-megfontolások viszont erősen korlátozzák a lehetséges momentumirányt és így az is meghatározható.

Az alábbiakban a mangán és néhány rendezett mangán ötvözet esetén nézzük meg a lehetséges mágneses szerkezeteket.

#### a) *A $\gamma$ mangán antiferromágneses szerkezete*

A  $\gamma$  mangánban 660 °K-nél mágneses fázisátalakulás játszódik le, antiferromágneses fázis alakul ki [18]. Ez az átalakulás valószínűleg elsőrendű, s akkor a számolás éppen a mangán esetén nem alkalmazható, de az alábbi vizsgálat általánosabb érvényességű, mint csak a mangán esete, mivel sok rendezetlen, mangánalapú ötvözet is ugyanolyan kristályszerkezetű, mint a tiszta mangán, vagyis lapcentrált köbös kristályszerkezetet alkot. Az itt meghatározott lehetséges momentumeloszlások között kell tehát keresnünk ezen ötvözetek szerkezetét.

A  $\gamma$  mangán lapcentrált köbös kristályszerkezetben kristályosodik, tércsoportja  $O_h^5$ . A translációs szimmetriát az  $\mathbf{a}_1 = (0, a, a)$ ,  $\mathbf{a}_2 = (a, 0, a)$  és  $\mathbf{a}_3 = (a, a, 0)$  bázisvektorok határozzák meg (a Bravais-cella élhossza  $2a$ ). Ezen kívül 48 forgatásos és tükrözéses szimmetriaelemmel rendelkezik a tércsoport. Könnyebb hivatkozás kedvéért a függelékben felsoroljuk ezt a 48 elemet.

A csavarszerkezetektől eltekintve a  $\mathbf{k} = 0$ -hoz tartozó ábrázolások és a Brillouin-zóna határán levő magas szimmetriájú  $\mathbf{k}$  vektorokhoz tartozó ábrázolások jönnek



számításba a szerkezet leírásánál. Ezek a vektorok a következők [10]:

$$\mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) = \left(0, 0, \frac{\pi}{a}\right), \quad \mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3) = \left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right) \quad \text{és}$$

$$\mathbf{k} = \frac{1}{4}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) + \frac{1}{2}(\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3) = \left(\frac{\pi}{a}, 0, \frac{\pi}{2a}\right).$$

A  $\mathbf{k}=0$  esetében a mágneses cella megegyezik a kémiai elemi cellával és ezért az ehhez a vektorhoz tartozó ábrázolások csak ferromágneses szerkezetet írhatnak le. A többi  $\mathbf{k}$  vektor olyan szerkezetet ad, melyben a mágneses cella egy vagy több irányban nagyobb, mint a kémiai elemi cella és ezek antiferromágneses szerkezetet adhatnak. A neutrondifrakciós mérésekből ismert, hogy mangán esetén a mágneses cella nem haladja meg a Bravais-cella méreteit. A felsorolt  $\mathbf{k}$  vektorok közül a  $\mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$  vektorhoz tartozó ábrázolások rendelkeznek ilyen transzformációs tulajdonsággal és ezért a továbbiakban elég ezzel foglalkoznunk.

A tércsoportok irreducibilis ábrázolásait Kovaljev [10] könyvében találjuk meg.

A  $\mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$  vektorhoz 10 irreducibilis ábrázolás tartozik, az ezekhez tartozó bázisfüggvényeket kell beírni a mágneses sűrűség (II. 3.2) kifejtésébe. Az irreducibilis ábrázolások közül  $\tau_1$  egységábrázolás kivételével a többi eleget tesz a (II. 3.5) feltételnek, vagyis azok nem adnak mágneses momentumot a mangán atomok helyén.

Állítsuk elő mindenekelőtt a  $\mathbf{k}$  vektor kis-csoportjához tartozó ábrázolásból a tércsoport egy ábrázolását az (I.1) fejezetben leírt módon. A kis-csoport elemei:  $h_1, h_2, h_3, h_4, h_{13}$  és  $h_{25}$  és ezeknek az elemeknek a szorzatai, összesen 16 elem. A  $h_5$  és  $h_9$  elem a  $\mathbf{k}_1 = \left(0, 0, \frac{\pi}{a}\right)$  vektort a  $\mathbf{k}_2 = \left(0, \frac{\pi}{a}, 0\right)$ , illetve  $\mathbf{k}_3 = \left(\frac{\pi}{a}, 0, 0\right)$  vektorba viszi át, a többi szimmetriaművelet pedig ezeket a vektorokat egymásba viszi, tehát a tércsoport ábrázolásának csillaga ezt a három vektort tartalmazza.

A kis-csoport egységábrázolásának  $\Phi_1$  bázisfüggvényéből előállítjuk a

$$\Phi_2 = T(h_5)\Phi_1, \quad \Phi_3 = T(h_9)\Phi_1 \quad (\text{III. 1.1})$$

függvényeket és ezek alkotják a tércsoport ábrázolásának bázisát. Transzlációs  $\Phi_1, \Phi_2$ , ill.  $\Phi_3$  a  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ , ill.  $\mathbf{k}_3$  vektor szerint transzformálódik.

Az  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  egység axiálvektorokkal megszorozva ezeket a  $\Phi$  függvényeket, kilenc függvényt kapunk, melyen a tércsoport már reducibilisen ábrázolódik. A ki-redukálás során egy három- és egy hatdimenziós ábrázolást kapunk, melyek a kis-csoport  $\tau_3$  és  $\tau_9$  ábrázolásainak kiterjesztésével kaphatók, vagyis

$$\tau_1 \otimes V = \tau_3 + \tau_9, \quad T^{(1)} \otimes V = T^{(3)} + T^{(9)},$$

ahol  $V$  az axiálvektor ábrázolás. A kisábrázolások és a  $\Phi_2$  és  $\Phi_3$  bázisfüggvényeket



definíáló (III. 1.1) összefüggés ismeretében a tércsoport ábrázolásának mátrixai (I. 1.9) alapján:

$$\begin{aligned}
 T^{(3)}(h_1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & T^{(3)}(h_2) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & T^{(3)}(h_3) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 T^{(3)}(h_4) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & T^{(3)}(h_5) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & T^{(3)}(h_9) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 T^{(3)}(h_{13}) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} & T^{(3)}(h_{25}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{III. 1.2}$$

$$\begin{aligned}
 T^{(9)}(h_1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & T^{(9)}(h_2) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 T^{(9)}(h_3) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & T^{(9)}(h_4) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{III. 1.3}$$

$$\begin{aligned}
 T^{(9)}(h_5) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & T^{(9)}(h_9) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 T^{(9)}(h_{13}) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & T^{(9)}(h_{25}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$



A többi szimmetriaelemhez tartozó mátrix ezekből szorzással meghatározható. A kiredukálás során az új bázisfüggvényeket is megkaphatjuk. Könnyű belátni, hogy a fenti transzformációs tulajdonságoknak az alábbi bázisfüggvények tesznek eleget; a háromdimenziós ábrázolásnál

$$\psi_1^{(3)} = e_z \Phi_1, \quad \psi_2^{(3)} = e_y \Phi_2, \quad \psi_3^{(3)} = e_x \Phi_3, \quad (\text{III. 1.4})$$

a hatdimenziós ábrázolásnál pedig

$$\begin{aligned} \psi_1^{(6)} &= e_x \Phi_1, & \psi_2^{(6)} &= e_y \Phi_1, & \psi_3^{(6)} &= e_z \Phi_2, \\ \psi_4^{(6)} &= e_x \Phi_2, & \psi_5^{(6)} &= e_y \Phi_3, & \psi_6^{(6)} &= e_z \Phi_3. \end{aligned} \quad (\text{III. 1.5})$$

Megjegyezzük, hogy a Kovaljev könyvben szereplő  $\tau_9$  mátrix kiterjesztésével más mátrixalakot kapnánk, mely a

$$\begin{aligned} \psi'_1 &= (e_x + ie_y) \Phi_1 & \psi'_2 &= (e_x - ie_y) \Phi_1 \\ \psi'_3 &= (e_z + ie_x) \Phi_2 & \psi'_4 &= (e_z - ie_x) \Phi_2 \\ \psi'_5 &= (e_z + ie_z) \Phi_3 & \psi'_6 &= (e_y - ie_z) \Phi_3 \end{aligned} \quad (\text{III. 1.6})$$

bázisnak felelne meg. A kettőt egy unitér transzformáció köti össze. Azért használtuk a fenti bázist, mert így közvetlenül látszik az ábrázolási mátrixok valós volta.

(II. 2.7) alapján a mágnesezettség így írható:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 c_i^{(3)} \psi_i^{(3)} + \sum_{j=1}^6 c_j^{(6)} \psi_j^{(6)}. \quad (\text{III. 1.7})$$

A következő lépésként az ezekből az együttthatókból felépíthető másodrendű és negyedrendű invariánsokat kell meghatároznunk, feltételezve, hogy ezután nem a  $\psi$  függvényeket, hanem a  $c$  együttthatókat tekintjük transzformálandó mennyiségeknek. A  $c$ -k transzformációját megadó mátrixok a fent megadott mátrixok transzponáltjai.

A két irreducibilis ábrázolást egymástól függetlenül vizsgálhatjuk, mert vegyes másodrendű invariáns nem képezhető belőlük. Nézzük először a  $\tau_3$  ábrázolást. Másodrendű invariáns csak egy van, mégpedig  $(c_1^{(3)})^2 + (c_2^{(3)})^2 + (c_3^{(3)})^2$ . Negyedrendű invariánst kettőt készíthetünk:

$$[(c_1^{(3)})^2 + (c_2^{(3)})^2 + (c_3^{(3)})^2]^2, \quad (c_1^{(3)})^4 + (c_2^{(3)})^4 + (c_3^{(3)})^4. \quad (\text{III. 1.8})$$

Az invariánsok megkeresésének egy csoportelméleti módja megtalálható [8]-ban. A hatdimenziós ábrázolás vizsgálatánál egy ennél egyszerűbb módszert mutatunk majd be.

A szabadenergia kifejezése (II. 2.12) alapján így írható:

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_0 + A [(c_1^{(3)})^2 + (c_2^{(3)})^2 + (c_3^{(3)})^2] + \\ &+ B_1 [(c_1^{(3)})^2 + (c_2^{(3)})^2 + (c_3^{(3)})^2]^2 + \\ &+ B_2 [(c_1^{(3)})^4 + (c_2^{(3)})^4 + (c_3^{(3)})^4] + \dots \end{aligned} \quad (\text{III. 1.9})$$



A szabadenergia kifejezését minimalizálva  $A < 0$ ,  $B_1 > 0$ ,  $B_2 > 0$  feltételek esetén, a következő megoldásokat kapjuk (elhagyva az ábrázolásra jellemző felső indexet):

1.  $c_1 \neq 0$ ,  $c_2 = c_3 = 0$  vagy  
 $c_2 \neq 0$ ,  $c_1 = c_3 = 0$  vagy  
 $c_3 \neq 0$ ,  $c_1 = c_2 = 0$
2.  $c_1^2 = c_2^2 \neq 0$ ,  $c_3 = 0$  vagy (III. 1.10)  
 $c_1^2 = c_3^2 \neq 0$ ,  $c_2 = 0$  vagy  
 $c_2^2 = c_3^2 \neq 0$ ,  $c_1 = 0$
3.  $c_1^2 = c_2^2 = c_3^2 \neq 0$ .

Ez lényegében három különböző típusú megoldást jelent. Az első típusnál

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = c_1 \psi_1^{(3)} \quad \text{vagy} \quad \mathbf{M}(\mathbf{r}) = c_2 \psi_2^{(3)} \quad \text{vagy} \quad \mathbf{M}(\mathbf{r}) = c_3 \psi_3^{(3)}. \quad (\text{III. 1.11})$$

(III. 1.4) beírásával kapjuk, hogy ezek  $z$ ,  $x$ , ill.  $Y$  irányú mágneses momentumú szerkezetet adnak. A  $\Phi_1$  függvény translációs tulajdonságából az is következik, hogy az  $(x, y)$  síkban a momentumok paralelek, a  $z$  irányban viszont a Bravais-cella félmagasságában levő atomokon a momentum antiparalelen áll. Az  $z$  irányú momentumú szerkezetet mutatja az 1a ábra. A köbös szimmetria miatt ilyen szerkezet az  $x$  és  $y$  irányban is kialakulhat. Ezeket írja le a  $c_2 \psi_2^{(3)}$  és  $c_3 \psi_3^{(3)}$  momentumsűrűség. A mágneses kristály szimmetriaműveletei a következők:  $h_1$ ,  $Rh_2$ ,  $Rh_3$ ,  $h_4$ ,  $Rh_{13}$ ,  $h_{25}$  és ezek szorzatai. A mágneses elemi cella alapvektorai az ábrán láthatók. Az egyik tengely kitüntetett volta miatt, a spin-rács kölcsönhatás következtében, a cella deformálódhat a szimmetria további csökkenése nélkül és tetragonálisá válhat. A momentumok a tetragonális tengely irányában fekszenek.

A második megoldás-típusnál válasszuk ki a  $c = c_2 = c_3 \neq 0$ ,  $c_1 = 0$  esetet. Az ennek megfelelő momentumsűrűség

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = c_2 \psi_2^{(3)} + c_3 \psi_3^{(3)} = c(\mathbf{e}_y \Phi_2 + \mathbf{e}_x \Phi_3). \quad (\text{III. 1.12})$$

Ez az  $(x, y)$  síkban fekvő momentumot ír le. A translációs tulajdonság miatt ( $\Phi_2$  a  $(0, \frac{\pi}{a}, 0)$ ,  $\Phi_3$  pedig a  $(\frac{\pi}{a}, 0, 0)$  vektor szerint transzformálódik)  $x$  irányban  $a$ -val történő eltolásnál az  $x$  komponensek előjelet váltanak,  $y$  irányban haladva pedig az  $y$  komponensek váltanak előjelet. Ezt a szerkezetet mutatja az 1b ábra. Ebben a típusban a többi kombináció is hasonló szerkezetet ad, mindig lapátló irányában mutatnak a momentumok. A mágneses cella egybeesik a Bravais-cellával.

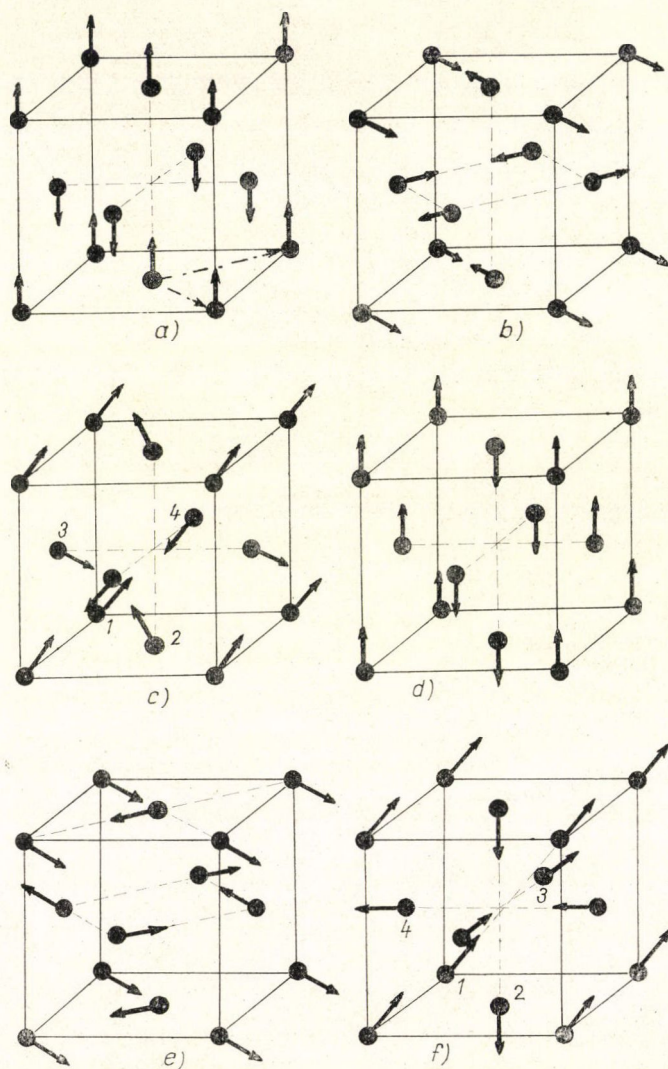
Végül a harmadik típusnál nézzük a  $c_1 = c_2 = c_3 = c \neq 0$  esetet. A mágneses momentum sűrűsége

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = c(\mathbf{e}_z \Phi_1 + \mathbf{e}_y \Phi_2 + \mathbf{e}_x \Phi_3). \quad (\text{III. 1.13})$$

Ebből olyan nem-kollineáris szerkezetet kapunk, melyben a momentum a térátlók irányába mutat. Az elemi cellában található négy különböző atomon a momentumok  $[111]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}1]$ ,  $[\bar{1}1\bar{1}]$ , ill.  $[1\bar{1}\bar{1}]$  irányúak (l. 1c ábrát).



A hatdimenziós  $T^{(9)}$  ábrázoláshoz tartozó szerkezetek vizsgálatánál is első feladatunk a másod- és negyedrendű invariánsok meghatározása. A másodrendű invariáns itt  $c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 + c_5^2 + c_6^2$ . A negyedrendű invariánsok meghatározására az alábbi módszert alkalmaztuk: a  $c_i$  együtthatókból előállítottunk egy tetszőleges negyedrendű kombinációt, például  $c_1^2 c_2 c_5$ -t és megnéztük, hogy a tércsoport elemei mibe viszik át ezt a kifejezést. Ha egy szimmetriaelem hatására új kombináció jelent meg, akkor ezt hozzáadtuk a kifejezéshez és az így bővített kifejezésre alkalmaztuk a



1. ábra. Lapcentrált köbös kristályban a  $\mathbf{k} = (0, 0)$  vektorhoz tartozó megengedett mágneses szerkezetek



szimmetriaelemeket, amíg olyan negyedrendű tagok összegéből álló kifejezést nem kaptunk, mely már invariáns volt minden szimmetriaművelettel szemben. Ezután vettünk egy eddig nem szerepelt másik negyedrendű kifejezést és ezzel is megismételtük a fenti eljárást. Az összes negyedrendű kifejezésen végigmenve így, megkapjuk az összes negyedrendű invariánst. A jelen példában az így kapott invariánsok, alkalmas lineárkombinációkban, a következők:

$$(c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 + c_5^2 + c_6^2)^2, \quad (c_1^2 - c_2^2 + c_3^2 - c_4^2 + c_5^2 - c_6^2)^2 \\ c_1^4 + c_2^4 + c_3^4 + c_4^4 + c_5^4 + c_6^4, \quad c_1^2 c_2^2 + c_3^2 c_4^2 + c_5^2 c_6^2. \quad (\text{III. 1.14})$$

A (III. 1.3)-ban felírt mátrixok megengednének egyéb invariánsokat is, pl.  $c_1^3 c_4 + c_2^3 c_5 + c_3^3 c_6 + c_4^3 c_1 + c_5^3 c_2 + c_6^3 c_3$ -t, a translációval szemben viszont ez a kifejezés nem lenne invariáns. Beírva az invariánsokat a (II. 2.12) kifejezésbe, a minimalizálás után megkapjuk  $c$ -k értékeit. Az összes lehetséges szerkezet meghatározása helyett néhány tipikus példát mutatunk be.

A legegyszerűbb megoldástípus az, melynél csak az egyik  $c$  vesz fel zérustól különböző értéket. Pl.  $c_3 \neq 0$  esetben  $\mathbf{M}(\mathbf{r})\Phi = c_3 \mathbf{e}_z \Phi_2$ . Az  $(x, z)$  síkban a momentumok paralelek. Az  $y$  irányban haladva ezek a ferromágneses síkok antiferromágnesesen csatolódnak (l. 1d ábrát).

Egy másik szerkezettípust kapunk abból a megoldásból, ha  $c_1 = c_5 = c \neq 0$ ,  $c_2 = c_3 = c_4 = c_6 = 0$ . A momentumok most is egyforma nagyságúak lesznek, de a szerkezet nem kollineáris. Az 1e ábrán mutatjuk be ezt a szerkezetet.

Végül olyan szerkezetek is lehetségesek, melyekben nem minden mangán atom momentuma azonos nagyságú, sőt az is lehetséges, hogy egyes mangán atomokon nincs irányított momentum. Pl. a  $c_1 = c_2 = c_3 = c_4 = c_5 = c_6 = c \neq 0$  esetben

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = c [\mathbf{e}_x(\Phi_1 + \Phi_2) + \mathbf{e}_y(\Phi_1 + \Phi_3) + \mathbf{e}_z(\Phi_2 + \Phi_3)]. \quad (\text{III. 1.15})$$

Az ennek megfelelő, az 1f ábrán bemutatott szerkezet olyan, hogy a négy mangán atom momentuma rendre az  $[111]$ ,  $[00\bar{1}]$ ,  $[0\bar{1}0]$  és  $[\bar{1}00]$  irányba mutat. Az oldallapokon levő atomok momentumai egyenlők és éppen kikompenzálják a csúcson levő atom momentumát.

Ily módon meghatározhatjuk mindazokat az antiferromágneses szerkezeteket, melyek lapcentrált köbös kristályban kialakulhatnak, ha a mágneses cella mérete nem haladja meg a Bravais-celláét. A kísérletek [18] arra utalnak, hogy a  $\gamma$ -mangán mágneses szerkezete ezek közül az 1a ábrán bemutatott szerkezetnek felel meg. Az  $\alpha - \gamma$  fázisátalakulás miatt a mérések bizonytalanok.

#### b) A $\text{Mn}_3\text{Pt}$ és $\text{Mn}_3\text{Rh}$ mágneses szerkezete

$\text{Mn}_3\text{Rh}$  rendezett ötvözetben Kowel és Kasper [19] neutrondiffrakciós mérései nem kollineáris antiferromágneses szerkezet jelenlétét mutatták.  $\text{Mn}_3\text{Pt}$  vizsgálatokor Sidhu és munkatársai [20] két egymásutáni fázisátalakulást és két különböző antiferromágneses fázis fellépését észlelték, de nem írták le pontosan a két szerkezetet. Ez a körülmény tette indokoltá a  $\text{Mn}_3(\text{Pt}, \text{Rh})$  ötvözetrendszerben lejátszódó fázisátalakulások további kísérleti vizsgálatát [21]. A neutrondiffrakciós mérések kiértékelésének megkönnyítésére meghatároztuk azokat a mágneses szerkezeteket, melyek másodrendű fázisátalakulással létrejöhetnek.



Nem vizsgáljuk az összes lehetőséget, hanem csak azokat, melyek a kísérlethől ismert translációs tulajdonságoknak eleget tesznek. A mérések szerint  $\text{Mn}_3\text{Rh}$ -ban a mágneses elemi cella egybeesik a kémiai elemi cellával,  $\text{Mn}_3\text{Pt}$ -ben pedig a szuper-reflexiók fellépése egy irányban duplázódott mágneses cellára utal.

A rendezett  $\text{Mn}_3\text{Pt}$  és  $\text{Mn}_3\text{Rh}$   $\text{Cu}_3\text{Au}$  típusú köbös kristályszerkezettel rendelkezik, tércsoportja  $O_h^1$  ( $Pm\ 3m$ ). A Pt, ill. Rh atomok egy kocka csúcspontjain helyezkednek el, a Mn atomok pedig a lapközepeken.

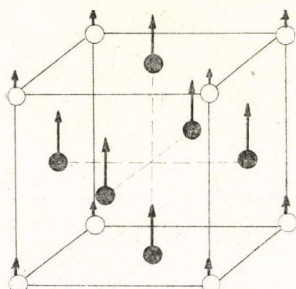
A fent említett translációs tulajdonságokból következik, hogy a mágneses momentum sűrűségének (II. 3.2) kifejtésében csak a  $\mathbf{k}=0$ -hoz és a  $\mathbf{k}=\frac{1}{2}\mathbf{b}_3=$

$=\left(0, 0, \frac{\pi}{2a}\right)$ -hoz tartozó ábrázolások bázisfüggvényeit kell figyelembe venni.

Vizsgáljuk először a  $\mathbf{k}=0$  esetet. Az  $O_h^1$  tércsoportban a  $\mathbf{k}=0$  vektorhoz 10 ábrázolás tartozik [10], ezek közül azonban csak a  $\tau_1$  egydimenziós és  $\tau_3$  kétdimenziós ábrázolás ír le mágneses momentumot a mangán atomok helyén, a csúcson levő Rh vagy Pt atomok esetleges momentumát csak  $\tau_1$  írhatja le. A  $\tau_1$  irreducibilis ábrázolás bázisfüggvényét  $\Phi_1$ -gyel jelölve az axiálvektorokkal szorzott  $\Psi_1=\mathbf{e}_x\Phi_1$ ,  $\Psi_2=\mathbf{e}_y\Phi_1$  és  $\Psi_3=\mathbf{e}_z\Phi_1$  hármas egy irreducibilis ábrázolás bázisfüggvényeit adja, mégpedig a  $\tau_5$  ábrázolását. (II. 3.7) alapján felírva  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ -t ezekkel a függvényekkel, meghatározhatjuk a másod- és negyedrendű invariánsokat, melyek:

$$c_1^2 + c_2^2 + c_3^2, \quad (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2)^2, \quad c_1^4 + c_2^4 + c_3^4. \quad (\text{III. 1.16})$$

Ezek az invariánsok azonosak a (III. 1.8)-ban kapott invariánsokkal és ezért a minimalizálás eredményeképpen a (III. 1.10)-ben felsorolt megoldástípusokat kapjuk. Az első típusból a  $c_3 \neq 0$  esetet véve  $\mathbf{M}(\mathbf{r})=c\mathbf{e}\Phi_1$  ferromágneses szerkezetet ír le  $z$  irányú momentummal. Az Rh atomokon is lehet irányított momentum. Ez a szerkezet látható a 2. ábrán. Az ehhez a megoldástípushoz tartozó másik két esetben  $x$ , illetve  $y$  irányú momentummal kaptunk ferromágneses szerkezetet.



2. ábra.  $\text{Cu}_3\text{Au}$  típusú kristály lehetséges ferromágneses szerkezete. A momentum [100], [110] vagy [111] irányú lehet

A második megoldástípusnál is (pl.  $c_1=c_2=c \neq 0$ ) ferromágneses szerkezetet kapunk, de a momentumok itt nem az élek, hanem a lapátlók irányába mutatnak. A harmadik megoldástípus pedig az [111] irányú momentummal rendelkező ferromágneses szerkezetet írhat le. Ezekben az esetekben is lehet irányított momentum az Rh atomokon, mégpedig az Mn atomok momentumával paralel vagy antiparalel beállításban és azokétól különböző nagyságú momentummal.

A  $\tau_3$  ábrázolást vizsgálva a két bázisfüggvényt jelöljük  $\Phi_1^{(3)}$  és  $\Phi_2^{(3)}$ -nek. Az egység axiálvektorokkal szorozva a kapott hat függvényen a tércsoport reducibilisen ábrázolódik, kiredukálással a  $\tau_4$  és  $\tau_5$  ábrázolásokat kapjuk. Könnyen belátható, hogy az ezekhez az ábrázolásokhoz tartozó bázisfüggvények a következők: a  $\tau_4$  ábrázoláshoz

$$\begin{aligned} \Psi_1^{(4)} &= \mathbf{e}_x(\Phi_1^{(3)} - \varepsilon^2 \Phi_2^{(3)}), & \Psi_2^{(4)} &= \mathbf{e}_y(\varepsilon^2 \Phi_1^{(3)} - \Phi_2^{(3)}), \\ \Psi_3^{(4)} &= \mathbf{e}_z(\varepsilon \Phi_1^{(3)} - \varepsilon \Phi_2^{(3)}) \end{aligned} \quad (\text{III. 1.17})$$



a  $\tau_5$  ábrázoláshoz pedig

$$\begin{aligned}\psi_1^{(5)} &= \mathbf{e}_x(\Phi_1^{(3)} + \varepsilon^2 \Phi_2^{(3)}), \quad \psi_2^{(5)} = \mathbf{e}_y(\varepsilon^2 \Phi_1^{(3)} + \Phi_2^{(3)}) \\ \psi_3^{(5)} &= \mathbf{e}_z(\varepsilon \Phi_1^{(3)} + \varepsilon \Phi_2^{(3)}),\end{aligned}\quad (\text{III. 1.18})$$

ahol  $\varepsilon = \exp\left(i \frac{2\pi}{3}\right)$ . A transzformációs mátrixok alakjából leolvasható a  $\Phi$  függvénynek az Mn atomok helyén felvett relatív értéke is. 1, 2, ill. 3-mal jelölve a  $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ ,  $\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ , ill.  $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$  helyeken ülő Mn atomokat, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\Phi_1^{(3)}(1) &= \Phi_1^{(3)}, \quad \Phi_1^{(3)}(2) = \varepsilon \Phi_1^{(3)}, \quad \Phi_1^{(3)}(3) = \varepsilon^2 \Phi_1^{(3)}(1), \\ \Phi_2^{(3)}(1) &= \varepsilon \Phi_1^{(3)}(1), \quad \Phi_2^{(3)}(2) = \Phi_1^{(3)}(1), \quad \Phi_2^{(3)}(3) = \varepsilon^2 \Phi_2^{(3)}(1).\end{aligned}\quad (\text{III. 1.19})$$

Ezeket beírva (III. 1.7) és (III. 1.18) kifejezésébe

$$\begin{aligned}\psi_1^{(4)}(1) &= 0, \quad \psi_1^{(4)}(2) = i\mathbf{e}_x \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_1^{(4)}(3) = -i\mathbf{e}_x \Phi_1^{(3)}(1), \\ \psi_2^{(4)}(1) &= -i\mathbf{e}_y \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_2^{(4)}(2) = 0, \quad \psi_2^{(4)}(3) = i\mathbf{e}_y \Phi_1^{(3)}(1), \\ \psi_3^{(4)}(1) &= i\mathbf{e}_z \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_3^{(4)}(2) = -i\mathbf{e}_z \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_3^{(4)}(3) = 0,\end{aligned}\quad (\text{III. 1.20})$$

illetve a  $\tau_5$  ábrázolásához tartozó bázisfüggvényeknél

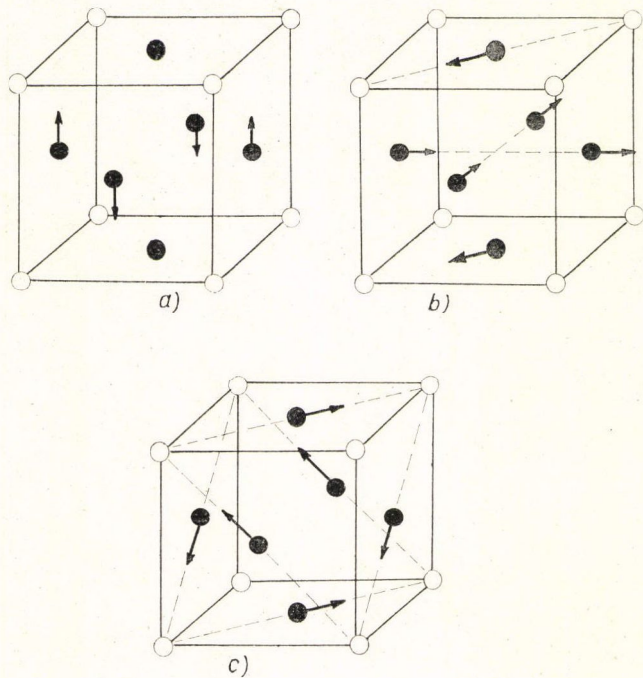
$$\begin{aligned}\psi_1^{(5)}(1) &= 2\mathbf{e}_x \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_1^{(5)}(2) = -\mathbf{e}_x \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_1^{(5)}(3) = -\mathbf{e}_x \Phi_1^{(3)}(1), \\ \psi_2^{(5)}(1) &= -\mathbf{e}_y \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_2^{(5)}(2) = 2\mathbf{e}_y \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_2^{(5)}(3) = -\mathbf{e}_y \Phi_1^{(3)}(1), \\ \psi_3^{(5)}(1) &= -\mathbf{e}_z \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_3^{(5)}(2) = -\mathbf{e}_z \Phi_1^{(3)}(1), \quad \psi_3^{(5)}(3) = 2\mathbf{e}_z \Phi_1^{(3)}(1).\end{aligned}\quad (\text{III. 1.21})$$

Mindkét ábrázolásnál a másod- és negyedrendű invariánsok megegyeznek a (III. 1.16), ill. (III. 1.8)-ban felsoroltakkal és ezért a minimalizálás után a (III. 1.10) megoldástípusokat kapjuk. Először a  $\tau_4$  ábrázoláshoz tartozó (III. 1.20) bázisfüggvényekkel leírt szerkezetet nézzük. Rögtön megemlítjük, hogy a ródium atomok helyére a (II. 3.4) Kovaljev-féle feltétel teljesül és azért ezeken az atomokon mágneses momentum nincs. Az első típusú megoldásnál a  $c_3 \neq 0$  esetet véve (III. 1.20)-ból láthatóan az alap- és fedőlapon levő Mn atom momentuma zérus, az oldallapokon levő Mn atomok momentumai pedig kikompenzálják egymást. Ez a szerkezet látható a 3a ábrán. A második megoldástípusból a  $c_1 = c_2 = c \neq 0$  esetet mutatja a 3b ábra. Itt  $\mathbf{M}(1) \sim -\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{M}(2) \sim \mathbf{e}_x$  és  $\mathbf{M}(3) \sim -\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y$ . Végül a harmadik megoldástípusnál olyan háromszögszerkezetet kapunk, melyben a momentumok a lapátlók irányában fekszenek (l. a 3c ábrát). Az egyes atomokon levő momentumok:

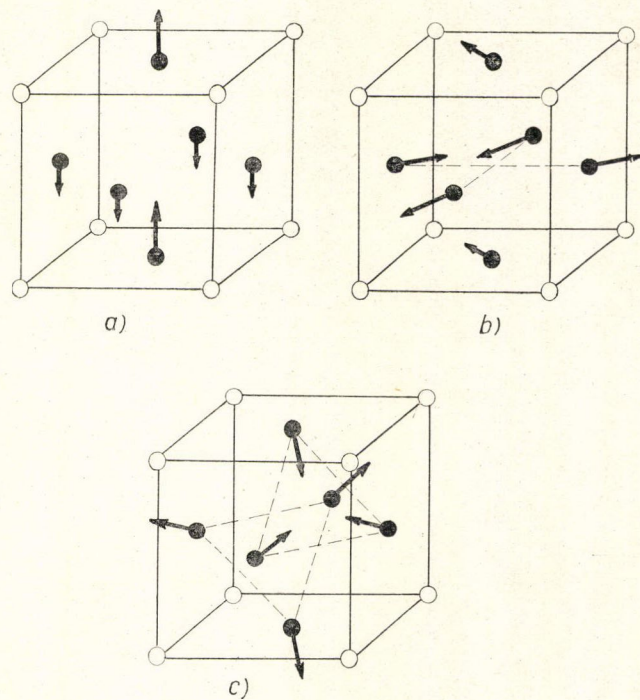
$$\mathbf{M}(1) \sim -\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{M}(2) \sim \mathbf{e}_x - \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{M}(3) \sim -\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y.$$

A  $\tau_5$  ábrázoláshoz tartozó (III. 1.21) bázisfüggvények segítségével is megnézhetjük a három típusú megoldáshoz tartozó mágneses szerkezeteket. Ezek a szerkezetek láthatók a 4. ábrán. Itt is adódik egy háromszög szerkezet, de azzal a különbséggel a 3c ábrán mutatott szerkezethez képest, hogy a momentumok itt az (111) síkon belül a  $[2\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}2\bar{1}]$  és  $[\bar{1}\bar{1}2]$  irányba mutatnak.





3. ábra.  $\text{Cu}_3\text{Au}$  típusú kristályban  
a  $\tau_4$  ábrázolásához tartozó antiferromágneses szerkezetek



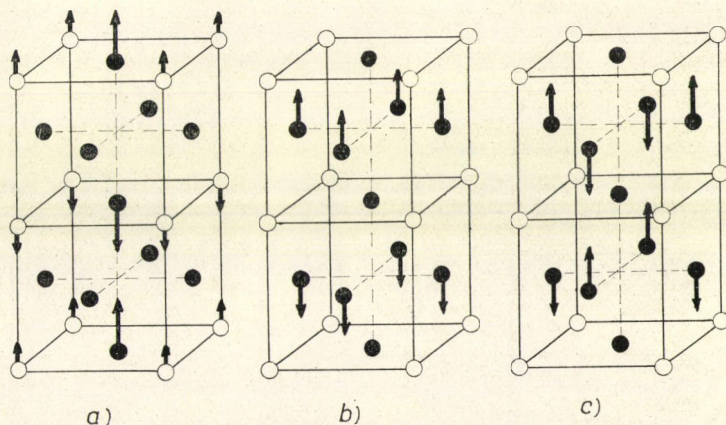
4. ábra.  $\text{Cu}_3\text{Au}$  típusú kristályban  
a  $\tau_5$  ábrázolásához tartozó antiferromágneses szerkezetek



Egy dologról elfeledkeztünk az előzőekben, pedig ez egyes esetekben igen lényeges lehet. Arról ugyanis, hogy a  $\tau_5$  ábrázolás kétszer szerepelt, először a  $\tau_1$ , másodszor a  $\tau_3$  ábrázolás bázisfüggvényeinek és az axiálvektoroknak összeszorzásából kapott függvények kiredukálásánál. A két esetet külön vizsgáltuk és így kaptunk ferro-, ill. antiferromágneses szerkezeteket. Valójában azonban a kétszer fellépő  $\tau_5$  ábrázolást együttesen kellett volna vizsgálni, figyelembe véve, hogy a két esethez tartozó  $c$  együtthatókból vegyes másod-, ill. negyedrendű invariánsok is előállíthatók. A lehetséges szerkezetek szempontjából ez azt jelenti, hogy a  $\tau_5$  ábrázolásból nem tisztán ferro-, ill. antiferromágneses szerkezetet kapunk, hanem mindig megjelenik a ferromágneses szerkezetre ráakódva az ugyanolyan típusú megoldáshoz tartozó antiferromágneses szerkezet is és fordítva. A 4c ábrán látható antiferromágneses szerkezettel kapcsolatban pl. ez azt jelenti, hogy az (111) síkban fekvő komponensekkel együtt megjelenhet [111] irányú ferromágneses komponens is. Az ily módon járulékosan megjelenő komponens várhatóan kis amplitúdójú, mert jelenléte anizotrópia erőkkkel kapcsolatos [21].

Ha az egyes komponensek nagyságrendi viszonyairól nem akarunk semmit mondani, és csak a kristály mágneses szimmetriája érdekel, akkor elég minden ábrázolást csak egyszer vizsgálni. Ebben az esetben azonban nem alkalmazható a momentum sűrűség meghatározására a fenti módszer, hanem a (II. 3) fejezet végén leírtak szerint kell eljárunk.

$\text{Mn}_3\text{Rh}$  mágneses szerkezete a neutrontdifrakciós mérések szerint a 4c ábrán bemutatott szerkezet. A fent említett megfontolások szerint a mágneses szimmetria megengedné, hogy [111] irányú eredő momentum jelenjen meg, a szuszceptibilitásmérések szerint viszont nincs kimutatható nagyságú eredő momentum. Megemlít-



5. ábra.  $\text{Cu}_3\text{Au}$  típusú kristályban egy irányban duplázott cellával kialakuló antiferromágneses szerkezetek

jük, hogy  $\text{Mn}_3\text{Pt}$ -ben is találtak hasonló háromszögszerkezetet, ez azonban elsőrendű fázisátalakulással jön létre.

$\text{Mn}_3\text{Pt}$ -ben a paramágneses fázisból másodrendű fázisátalakulással kialakuló mágneses szerkezetben a mágneses cella mérete egy irányban nagyobb, mint a kémiai elemi cella. Anélkül, hogy a számolás részleteibe itt belemennénk, megjegyezzük,

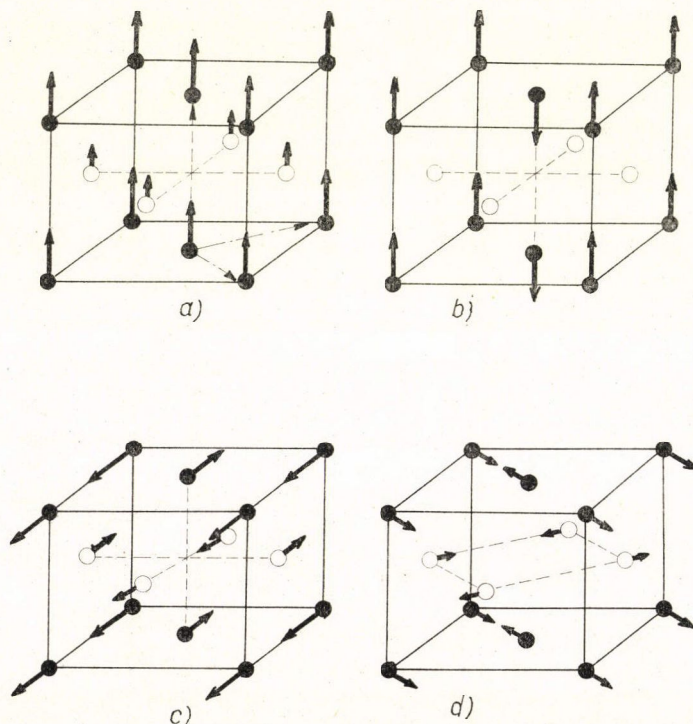


hogy a lehetséges mágneses szerkezetnek két lényeges vonása van. Az egyik az, hogy egyirányú duplázódás esetén a momentum csak ennek a tengelynek az irányában mutathat, a másik pedig az, hogy vagy csak az alaplapon van momentum, vagy csak az oldallapon, de egyszerre nem jelenhet meg minden Mn atomon mágneses momentum. Az egymás fölötti rétegekben a momentumok antiparalelek. Az alaplapon egyértelmű a momentumok elhelyezkedése, ilyenkor a Pt atomokon is lehet rendezett momentum. Az oldallapokon viszont kétféleképpen lehet a momentumokat elhelyezni. Ezeket a szerkezeteket mutatja az 5. ábra. A kísérleti adatok arra utalnak, hogy a rendezett  $\text{Mn}_3\text{Pt}$  ötvözetben az 5c ábrán látható szerkezet valósul meg.

c) Az  $\text{MnPt}$  és  $\text{MnPd}$  mágneses szerkezete

Következő példaként az 50–50%-os összetételű  $\text{MnPt}$ , illetve az azonos kristályszerkezetű  $\text{MnPd}$  ötvözetet vizsgáljuk. Ugyancsak  $\text{CuAuI}$  típusú  $D_{4h}^1$  ( $P4/mmm$ ) tércsoportú kristályszerkezettel rendelkezik még néhány más mangánötvözet is, így megfontolásaink azokra is igazak.  $\text{Mn Au}$  [22],  $\text{Mn Ni}$  [23],  $\text{Mn Rh}$  [24] és  $\text{Mn Pt}$  [25] esetén már korábbi mérések kimutattak antiferromágneses szerkezetet, a  $\text{Mn Pd}$  [26] szerkezetét pedig az intézetben vizsgáltuk.

Megint csak egy meghatározott cellával rendelkező mágneses szerkezetet vizsgálunk. A 6. ábrán látható, a primitív tetragonális cellához képest kétszeres térfogatú



6. ábra.  $\text{CuAuI}$  típusú kristályszerkezetben lehetséges mágneses szerkezetek



cellában indexelhetők a reflexiók, és ezért az ilyen cellájú szerkezeteket keressük. A korábban bemutatott és nagy csoportelméleti apparátust igénylő számolással szemben itt most egy igen egyszerű módszert mutatunk be, ez azonban csak ilyen egyszerű szerkezeteknél jelent könnyítést.

A translációs tulajdonságokból következik, hogy vagy minden Mn atom momentuma paralel (l. 6a ábrát), vagy az alaplap közepén levőé antiparalel a csúcson levő momentumokhoz képest. A tényleges feladat a momentumoknak a kristálytani tengelyekhez viszonyított helyzetének meghatározása. A csúcson levő atom momentuma legyen  $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ . Nézzük meg a tércsoport elemeinek hatását ezekre a momentumkomponensekre:

	$h_1$	$h_2$	$h_3$	$h_4$	$h_{13}$	$h_{14}$	$h_{15}$	$h_{16}$	$h_{25}$
$M_x$	$M_x$	$M_x$	$-M_x$	$-M_x$	$-M_y$	$-M_y$	$M_y$	$M_y$	$M_x$
$M_y$	$M_y$	$-M_y$	$M_y$	$-M_y$	$-M_x$	$M_x$	$-M_x$	$M_x$	$M_y$
$M_z$	$M_z$	$-M_z$	$-M_z$	$M_z$	$-M_z$	$M_z$	$M_z$	$-M_z$	$M_z$

Ha a cellában több atom van, akkor mindegyikre fel kell írunk a komponensek transzformációs tulajdonságait. Határozzuk meg ezután az ezekből a komponensekből felépíthető másod- és negyedrendű invariánsokat. A jelen példában ezek:

$$M_x^2 + M_y^2, \quad M_z^2, \quad (M_x^2 + M_y^2)^2, \quad M_x^4 + M_y^4, \quad M_z^4, \quad (M_x^2 + M_y^2) M_z^2.$$

A szabadenergia kifejezését (II. 3.12)-hez hasonlóan írjuk fel, de a  $c$ -kből felépített invariánsok helyett ezeket az invariánsokat használjuk, majd az  $M_z$  komponensek szerint minimalizálunk azzal a feltétellel, hogy az egyik másodrendű invariáns együtthatója negatív, a többi együttható pozitív. Végül is háromféle megoldást kapunk:

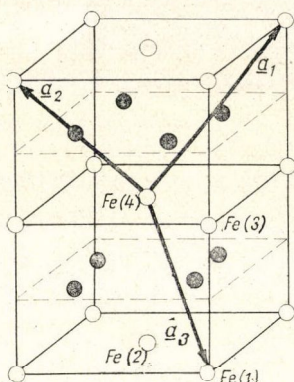
1.  $M_z \neq 0, \quad M_x = M_y = 0$
2.  $M_x \neq 0, \quad M_x = M_z = 0$  vagy  
 $M_y \neq 0, \quad M_x = M_z = 0$
3.  $M_x^2 = M_y^2 \neq 0, \quad M_z = 0.$

A momentum tehát a tetragonális tengely irányába, vagy arra merőleges él, vagy lapátló irányába mutat. Ez a háromféle szerkezet látható a 6b, c és d ábrán.

Eddig nem vizsgáltuk azt, hogy vajon lehet-e irányított momentum az oldal-lap közepeken ülő nem mangán atomokon. A Mn atomok momentumának ismeretében megnézhetjük, hogy lehet-e a Pt, ill. Pd atomokhoz olyan momentum-irányítást rendelni, mely nem változtatja meg a Mn atomok momentumai által megszabott mágneses szimmetriát. Ha ilyen irányítás lehetséges, mint ahogy a 2. és 3. megoldástípusnál ez a helyzet, akkor a Pt, ill. Pd atomok is rendelkezhetnek irányított momentummal. A nagyságrendi viszonyokról annyit mondhatunk, hogy mivel a Pt atomok helyén az első szomszédoktól származó effektív tér zérus, a távolabbi szomszédok, ill. az anizotrópia effektusok hatása pedig kicsi, a Pt atomokon levő irányított momentum nagysága nagyságrenddel kisebb, mint a Mn atomok momentuma.



A neutrondiffrakciós mérések szerint az MnPt, ill. MnPd mágneses szerkezete a 6c, ill. d ábrán bemutatott szerkezetek valamelyike. A Mn atomok ülnek a csúcson, a Pt, ill. Pd atomok pedig a lapközepeken. A porfelvétel alapján a kétféle momentumirányítás között nem lehet különbséget tenni. Megemlítjük, hogy Kasper és Kouvel [23] MnNi esetén általánosabb szerkezeteket is vizsgált, mint az itt tárgyaltak, de azok a paramágneses fázisból elsőrendű fázisátalakulással jöhetnének csak létre.



7. ábra.  $\text{FeGe}_2$  Bravais-cellája a bázisvektorokkal

## 2. $\text{FeGe}_2$ mágneses szerkezete

$\text{FeGe}_2$  mágneses szerkezetét többen vizsgálták kísérletileg, az eredmények között azonban több ellentmondás akadt. Yasukochi és munkatársai [27] gyenge ferromágnességet észleltek, Pauthenet [28], valamint Forsyth és munkatársai [29] viszont tisztán antiferromágnesesnek találták az  $\text{FeGe}_2$  mintájukat. A neutrondiffrakciós mérések [30, 31, 32] porfelvétel alapján egyszerű kollineáris antiferromágneses szerkezetre utalnak azonos mágneses és Bravais-cellával. Forsyth és munkatársai [29] egykristályon végzett mérései viszont azonos cellájú, de nem kollineáris szerkezetet adtak. Ezen ellentmondások tették szükségessé a másodrendű fázisátalakulással kialakuló szerkezetek meghatározását [33].

$\text{FeGe}_2$  tércentrált tetragonális kristályszerkezetű, tércsoportja  $D_{4h}^{18}$  (I4/mcm). A Bravais-cellában négy Fe atom van, ezek momentumait jelöljük  $\mathbf{M}_1$ ,  $\mathbf{M}_2$ ,  $\mathbf{M}_3$ ,  $\mathbf{M}_4$ -gyel. A négy atom elhelyezkedését a 7. ábra mutatja. Az itt nem részletezett egyszerű számolás eredményeként kapjuk, hogy a momentumok egymáshoz képest négyféleképpen helyezkedhetnek el:

1.  $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_3 = \mathbf{M}_4$  ferromágneses, tércentrált tetragonális
2.  $\mathbf{M}_1 = -\mathbf{M}_2 = -\mathbf{M}_3 = \mathbf{M}_4$  antiferromágneses, tércentrált tetragonális
3.  $\mathbf{M}_1 = -\mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_3 = -\mathbf{M}_4$  antiferromágneses, primitív tetragonális
4.  $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2 = -\mathbf{M}_3 = -\mathbf{M}_4$  antiferromágneses, primitív tetragonális.

Mindegyik szerkezet kollineáris és gyenge ferromágnességet [7] egyik sem enged meg. Az észlelt ferromágneses járulék [27] valószínűleg szennyezésektől származott.

A szimmetriamegfontolások a momentumok irányára is szigorú megkötést adnak. Vagy a [001] irányban, vagy pedig a (001) síkon belül az [100] vagy [110] irányban fekszenhet a momentum. Közbenző szögek nincsenek megengedve.

A porfelvételek jó egyezésben vannak a 3. modellel, az egykristályos mérések viszont egyik szerkezettel sem egyeznek. Vagy hibás volt az egykristályos mérés, vagy pedig az észlelt nem-kollineáris szerkezet nem egy másodrendű fázisátalakulással jön létre. További vizsgálatok szükségesek ennek eldöntésére.



#### IV. Több lépésű mágneses fázisátalakulások

##### 1. A több lépésű fázisátalakulások elmélete

A (II. 3.) fejezetben tárgyaltuk a paramágneses fázisból kialakuló mágneses szerkezetek meghatározását. Láttuk, hogy a különböző irreducibilis ábrázolások külön vizsgálhatók. Pontosabban szólva a mágneses fázis szimmetriájának meghatározásához elegendő a (II. 3.7) sorfejtésben minden irreducibilis ábrázolást külön vizsgálni. A (II. 3.2) sorfejtésre már nem igaz ez az állítás. Előfordulhat ugyanis, hogy a különböző  $\alpha$  komponensek kifejtésében más és más ábrázolást véve, az  $\mathbf{e}_\alpha$  axiálvektorokkal való szorzás után ugyanaz az ábrázolás már kétszer fordul elő. Ezzel a kérdéssel majd a következő fejezetben foglalkozunk. Itt most feltételezzük, hogy továbbra is minden ábrázolás csak egyszer fordul elő.

Írjuk fel a (II. 3.12) szabadenergiakifejezést:

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_i A_i f_i^{(2)}(c) + \sum_j B_j f_j^{(4)}(c) + \dots$$

Minden irreducibilis ábrázoláshoz egy másodrendű invariáns tartozik [8], a negyedrendű invariánsok között vannak vegyes invariánsok is, melyek különböző irreducibilis ábrázolásokhoz tartozó  $c_i$ -ket tartalmaznak. A paramágneses fázisból akkor jelenik meg egy mágneses fázis, amikor az egyik másodrendű invariáns együttthatója negatívvá válik. A minimalizálással meghatározott zérustól különböző  $c_i^{(1)}$  együttthatók a hőmérséklet függvényei és ezzel együtt az  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  mágneses sűrűség is változik a hőmérséklettel, de oly módon, hogy közben a kristály szimmetriája változatlan marad. A hőmérsékletet tovább csökkentve egy  $T_{c_2}$ -nél újabb fázisátalakulás következhet be. Egy új mágneses momentum komponens jelenik meg és ezzel a szimmetria is megváltozik. A jelen tárgyalásban ez annak felel meg, hogy a  $c_i$  együttthatók egy újabb  $c_i^{(2)}$  sorozata válik zérustól különbözővé. A fázisátalakulás akkor lesz másodrendű, ha  $T_{c_2}$ -ben a  $c_i$ -k folytonosan változnak. A vegyes negyedrendű invariáns létezése miatt  $c_i$ -k egymást befolyásolják, de feltehetjük, hogy  $c_i^{(1)}$  változása lassú és ezért konstansnak tekinthető. Ekkor  $c_i^{(2)}$ -k másodrendű invariánsának együttthatójaként nem egyszerűen egy  $A_i(T)$  veendő, hanem a vegyes negyed-, hatod- és magasabb rendű invariánsokból is az  $f^{(2)}(c_i^{(2)})$  leválasztásával kapott rész. Ezek összegének kell negatívvá válnia. Eredményül így egy olyan mágneses szerkezetet kapunk, mely két mágneses szerkezet szuperpozíciója, melyek a paramágneses fázisból másodrendű fázisátalakulással külön-külön is kialakulhattak volna. Több lépésben már egészen bonyolult mágneses szerkezetek alakulhatnak ki.

A fenti eljárásnál a magasabb rendű invariánsokat is figyelembe kellett venni, mert  $T_{c_2}$  közelében  $c_i^{(1)}$  már nem tekinthető kicsinek. Ezt megkerülhetjük az alábbi módon [34].  $\mathbf{M}_I(\mathbf{r}, T)$   $\mathbf{M}_{II}(\mathbf{r}, T)$ -vel jelölve  $T_{c_2}$  fölött, ill. alatt a mágneses momentum sűrűségét, vizsgáljuk a

$$\mathbf{M}_d(\mathbf{r}, T) = \begin{cases} \mathbf{M}_{II}(\mathbf{r}, T) - \mathbf{M}_I(\mathbf{r}, T_{c_2}) & \text{ha } T < T_{c_2} \\ 0 & \text{ha } T > T_{c_2} \end{cases} \quad (\text{IV. 1.1})$$

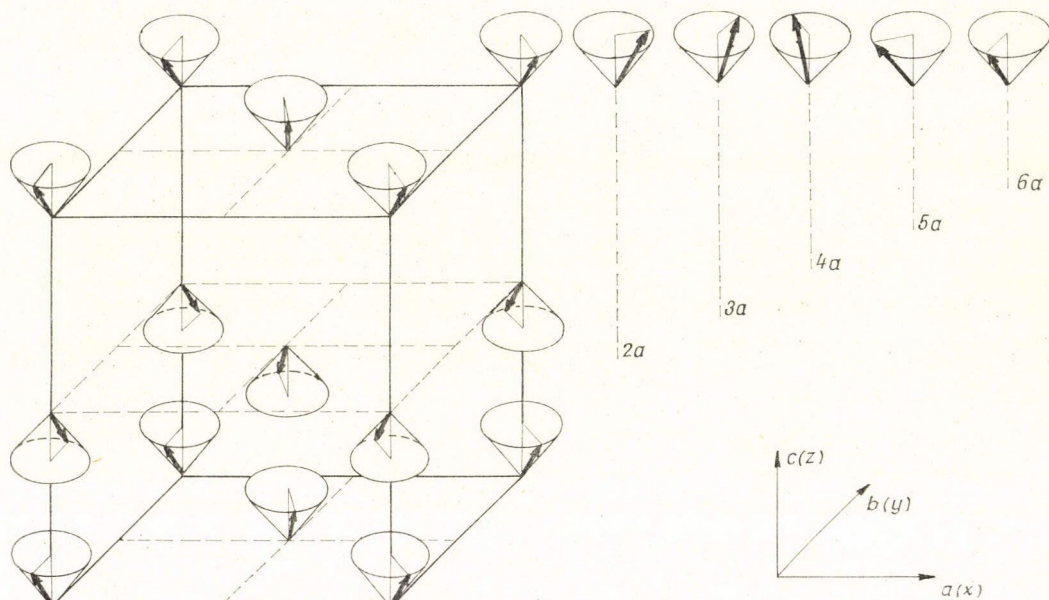
függvényt és fejtjük ezt ki (II. 3.2) mintájára. A korábbiakhoz hasonló számolással megkaphatjuk az újonnan megjelenő  $\mathbf{M}_d(\mathbf{r})$  mágneses momentumot, mely ráakódik a  $T_{c_2}$  fölötti  $\mathbf{M}_I(\mathbf{r})$  momentumeloszlásra.



Az új mágneses komponens meghatározásánál ugyanolyan szabadenergia-minimalizálást végzünk, mint a paramágneses—mágneses fázisátalakulásnál, ezért a termodinamikai viselkedést is (II.2)-höz hasonlóan tárgyalhatnánk. Most is igaz lesz, hogy a fázisátalakulás a szuszceptibilitásban szingularitást okoz. A fajhőre ez az elmélet véges ugrást ad, a fluktuációk figyelembevételével viszont a fajhő is szinguláris lesz.

## 2. A $\text{MnSO}_4$ lehetséges mágneses fázisátalakulásai

G. Will és munkatársai [35] nemrégén közölték az ortorombos  $\text{MnSO}_4$ -en végzett neutrondiffrakciós mérés eredményét.  $77^\circ\text{K}$ -en és  $4,2^\circ\text{K}$ -en mérve  $4,2^\circ\text{K}$ -nél járulékos csúcsokat találtak, melyek alapján kúpos spirálszerkezetet határoztak meg. A Mn atomok momentumának z komponensei a (001) síkban ferromágnesesen csatolódnak, az egymás feletti síkok viszont antiferromágnesesen. Az (x, y) síkbeli



8. ábra.  $\text{MnSO}_4$  mágnes szerkezete

momentumkomponens viszont cikloidos spirálszerkezetet alkot. A 8. ábra mutatja ezt a szerkezetet. Azt akarjuk most megvizsgálni [34], hogy ez a szerkezet hogyan alakulhat ki, feltéve, hogy minden fázisátalakulás másodrendű.

A  $\text{MnSO}_4$  bázislapcentrált ortorombos Bravais-cellával rendelkezik, tércsoportja

$$D_{2h}^{17} (C \text{ mcm}) [36]. \text{ A kristály szimmetriaelemei: } h_1, h_3, h_{25}, h_{27}, g_2 = \left\{ 0 \ 0 \ \frac{1}{2} \middle| h_2 \right\},$$

$$g_4 = \left\{ 0 \ 0 \ \frac{1}{2} \middle| h_4 \right\}, g_{26} = g_2 \cdot h_{25}, g_{28} = g_4 \cdot h_{25}.$$



A  $z$  komponens translációs szempontból a  $\mathbf{k}=0$  vektor szerint transzformálódik, mivel az elemi cella csúcspontjain azonos a momentum  $z$  komponense. Az  $(x, y)$  síkbeli komponens viszont a  $\mathbf{k} = \left(\frac{\pi\mu}{a}, 0, 0\right)$  vektor szerint transzformálódik, (A mérések szerint  $\mu \sim 1/6$ .) A különböző translációs tulajdonságok miatt az ezen  $\mathbf{k}$  vektorokhoz tartozó irreducibilis ábrázolásoknak megfelelő  $c_i$ -kből nem lehet vegyes másodrendű invariánst felírni. Ebből következik, hogy a két komponens csak egymás után, két különböző fázisátalakulásban jelenhet meg.  $\text{MnSO}_4$ -ben tehát legalább két egymásutáni fázisátalakulás van, ha azok másodrendűek.

Vizsgáljuk meg még az  $(x, y)$  síkbeli forgó komponenst. A  $\mathbf{k} = \left(\frac{\pi\mu}{a}, 0, 0\right)$  vektor csillagába  $\mathbf{k}$ -n kívül  $-\mathbf{k}$  tartozik, a csillaghoz pedig négy irreducibilis ábrázolás:

$$\begin{array}{cccccccc} h_1 & g_2 & h_3 & g_4 & h_{25} & g_{26} & h_{27} & g_{28} \\ T_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ T_2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array} \quad (\text{IV. 2.1})$$

$$\begin{array}{cccccccc} T_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ T_4 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

A (II. 3.4) feltétel alapján meghatározva, csak a  $T_1$  és  $T_3$  ábrázolás bázisfüggvényei írhatnak le mágneses momentumot a Mn atomok helyén.  $\Phi_i^{(1)}$ , ill.  $\Phi_i^{(3)}$ -mal jelölve a bázisfüggvényeket

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} (c_{1\alpha}^{(1)} \Phi_1^{(1)} + c_{2\alpha}^{(1)} \Phi_2^{(1)} + c_{1\alpha}^{(3)} \Phi_1^{(3)} + c_{2\alpha}^{(3)} \Phi_2^{(3)}) \quad (\text{IV. 2.2})$$

Transzlációnál  $\Phi_1^{(i)}$ , ill.  $\Phi_2^{(i)}$  a  $\mathbf{k}$ , ill.  $-\mathbf{k}$  vektor szerint transzformálódik, ezért  $\Phi_1^{(i)}(\mathbf{r}) = \Phi_2^{(i)*}(\mathbf{r})$  és  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  valós volta miatt  $c_{21}^{(i)} = c_{22}^{(i)*}$ . A  $c$ -k transzformációs tulajdonságát vizsgálva, azok a  $T_1$  és  $T_3$  ábrázolás, valamint az axiálvektor ábrázolás direkt szorzatával adhatók meg, mégpedig

$$\begin{array}{ccccccc} c_{1x}^{(1)}, & c_{2x}^{(1)} \rightarrow T_2, & c_{1x}^{(3)}, & c_{2x}^{(3)} \rightarrow T_4 \\ c_{1y}^{(1)}, & c_{2y}^{(1)} \rightarrow T_3, & c_{1y}^{(3)}, & c_{2y}^{(3)} \rightarrow T_1 \\ c_{1z}^{(1)}, & c_{2z}^{(1)} \rightarrow T_4, & c_{1z}^{(3)}, & c_{2z}^{(3)} \rightarrow T_2 \end{array} \quad (\text{IV. 2.3})$$

Láthatóan az  $x$  és  $y$  komponensek különböző irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódnak, vegyes másodrendű invariáns belőlük nem készíthető és ezért egy



másodrendű fázisátalakulásban nem jelenhetnek meg. Ha az  $x$  és  $y$  irányban az oszcilláló komponensek különböző hőmérsékleten jelennek meg, akkor amplitúdójuk különböző, és a spirálszerkezet általában elliptikus spirál lesz.

Észre kell vennünk, hogy a  $T_2$  és  $T_4$  ábrázolás, mely az  $x$  irányú momentumot leírja,  $z$  irányú momentumkomponenst is adhat. A szabadenergia a következő alakban írható:

$$\begin{aligned}\Phi = & \Phi_0 + A_1 c_{1x}^{(1)} c_{2x}^{(1)} + A_2 c_{1z}^{(3)} c_{2z}^{(3)} + \frac{1}{2} B_1 (c_{1x}^{(1)} c_{2x}^{(1)})^2 + \\ & + \frac{1}{2} B_2 (c_{1z}^{(3)} c_{2z}^{(3)})^2 + \alpha_1 c_{1x}^{(1)} c_{2z}^{(3)} + \alpha_2 c_{1z}^{(3)} c_{2x}^{(1)} + \dots + \\ & + A_3 c_{1x}^{(3)} c_{2x}^{(3)} + A_4 c_{1z}^{(1)} c_{2z}^{(1)} + \frac{1}{2} B_3 (c_{1x}^{(3)} c_{2x}^{(3)})^2 + \\ & + \frac{1}{2} B_4 (c_{1z}^{(1)} c_{2z}^{(1)})^2 + \alpha_3 c_{1x}^{(3)} c_{2z}^{(1)} + \alpha_4 c_{1z}^{(1)} c_{2x}^{(3)} + \dots\end{aligned}\quad (\text{IV. 2.4})$$

A szabadenergia (IV. 2.4) kifejezése két egymástól független rész összege, külön-külön vizsgáljuk azokat. Az első részt véve és bevezetve a  $c_{1x}^{(1)} = \eta_x e^{ix}$ ,  $c_{2x}^{(1)} = \eta_x e^{-ix}$ ,  $c_{1z}^{(3)} = \eta_z e^{iz}$ ,  $c_{2z}^{(3)} = \eta_z e^{-iz}$  jelölést

$$\Phi = \Phi_0 + A_1 \eta_x^2 + A_2 \eta_z^2 + \frac{1}{2} B_1 \eta_x^4 + \frac{1}{2} B_2 \eta_z^4 + (\alpha_1 + \alpha_2) \eta_x \eta_z + \dots \quad (\text{IV. 2.5})$$

$\eta_x$  és  $\eta_z$  szerint minimalizálva

$$\begin{aligned}2A_1 \eta_x + 2B_1 \eta_x^3 + (\alpha_1 + \alpha_2) \eta_z &= 0 \\ 2A_2 \eta_z + 2B_2 \eta_z^3 + (\alpha_1 + \alpha_2) \eta_x &= 0\end{aligned}\quad (\text{IV. 2.6})$$

A szabadenergia sorfejtésében az egyes tagok nagyságrendi viszonyait, azok kicserélődési vagy anizotrópia jellegét úgy határozhatjuk meg, hogy  $\Phi$ -t felírjuk a mágneses momentum komponensekkel és a teljes gömbszimmetriát mutatókat nevezzük kicserélődési jellegű tagoknak. Az  $A_i$  és  $B_i$  együtthatók kicserélődési és anizotrópia kölcsönhatással kapcsolatosak,  $\alpha_i$  pedig csak az anizotrópia energiával. Az anizotrópia energia nagyságrendekkel kisebb a kicserélődési energiánál és ezért  $\alpha/A$  és  $\alpha/B$  sokkal kisebb, mint egy. Iterációval oldva meg (IV. 2.6)-ot, nulladik közelítésben

$$\eta_x = \sqrt{-\frac{A_1}{B_1}}, \quad \eta_z = 0 \quad \text{ha} \quad T < T_c \quad (\text{IV. 2.7})$$

és  $A_1(T_c) = 0$ . (IV. 2.6) második egyenletéből viszont első közelítésben azt kapjuk, hogy

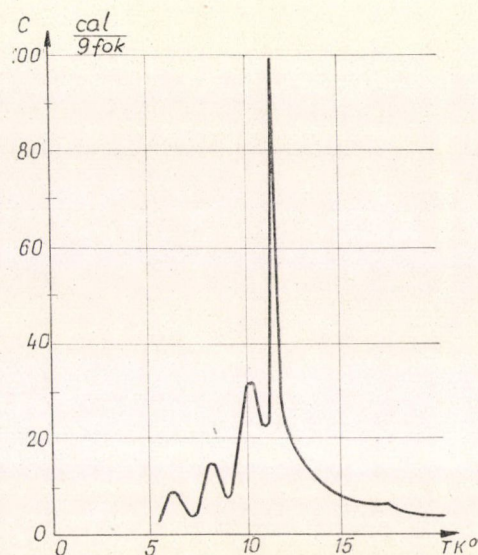
$$\frac{\eta_z}{\eta_x} = -\frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2A_2} \quad (\text{IV. 2.8})$$

Az előbb mondottak alapján viszont  $\eta_z/\eta_x \ll 1$  és ezért kísérletileg nehéz feladat az ily módon jelentkező  $z$  irányú oszcilláló komponens megfigyelése.



A fenti megfontolások végkövetkeztetése az, hogy a [35]-ben leírt mágneses szerkezet másodrendű fázisátalakulásokkal csak három egymásutáni átalakulással jöhet létre. Az  $(x, y)$  síkbeli spirálszerkezetnek általában elliptikus spirálnak kell lennie és az oszcilláló  $x$  komponenssel együtt a  $z$  irányban is meg kell jelennie egy oszcilláló komponensnek, ennek az amplitúdója azonban nagyon kicsi lehet.

Javasoltuk a szerkezet további kísérleti vizsgálatát neutroindiffrakciós módszerekkel, másrészt a fázisátalakulások tényének meghatározását fajhő és szuszeptibilitás méréssel, hiszen a fázisátalakulások ezen mennyiségek hőmérsékletfüggésében anomáliaként jelentkeznek. *Krebs* és munkatársai [37] nemrégén  $\text{MnSO}_4$ -en elvégzett fajhőmérése megerősíteni látszik a fenti szerkezet több lépésben történő kialakulását. A 9. ábrán közölt eredmény szerint a  $11,5^\circ\text{K}$ -en levő Néel-hőmérséklet alatt, de  $5^\circ\text{K}$  fölött a fajhőben három csúcst észleltek. Ezek közül kettő megfelelhet a fenti fázisátalakulásoknak, a harmadikra viszont még nincs magyarázat. További neutroindiffrakciós mérésekre lenne szükség, hogy meg lehessen határozni az átalakulások sorrendjét is.



9. ábra.  $\text{MnSO}_4$  fajhőjének hőmérsékletfüggése [37]

## V. Kvázi-fázisátalakulás

### 1. A kvázi-fázisátalakulás fogalma

A paramágneses fázisból másodrendű fázisátalakulással létrejövő mágneses szerkezet szimmetriáját vizsgálva megállapítottuk, hogy elégedő a (II. 3.7) kifejtésben minden irreducibilis ábrázolást egyszer figyelembe venni. Valójában az igazolható [8], hogy a (II. 3.2) kifejtésben minden irreducibilis ábrázolás bázisfüggvényeinek egyszer kell előfordulniuk. A  $\Phi$  bázisfüggvényeket az axiálvektorokkal szorozva és ezt a függvényrendszert kiredukálva a  $\psi$  függvények már azonos irreducibilis ábrázolás szerint is transzformálódhatnak, amint erre a (III. 1) fejezet b) pontjában láttunk is példát. Ez másképpen azt jelenti, hogy (II. 3.2)-ben a  $c_{ai}$  együtthatók egy irreducibilis ábrázolás és az axiálvektor ábrázolás direkt szorzataként transzformálódván, különböző  $\alpha$  és  $i$  index mellett  $c_{ai}$ -k azonos transzformációs tulajdonsággal rendelkeznek és így belőlük vegyes másodrendű invariáns is készíthető. Ennek lesz a továbbiakban lényeges szerepe, és egy új típusú mágneses rendeződéshez fog vezetni [38]. Lényeges megjegyezni, hogy ez a mágneses momentum vektor jellegével kapcsolatos és ezért ötvözetrendeződéses fázisátalakulásokra az alábbiak nem vonatkoznak.

Legyen  $c_{j\alpha}^{(h)}$  (II. 3.2)-ben a  $h$  irreducibilis ábrázolás  $j$  bázisfüggvényéhez tartozó

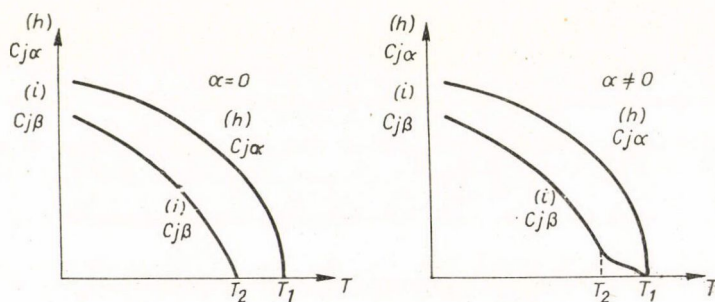


együttható,  $c_{j\beta}^{(i)}$  pedig tartozzon az  $i$  irreducibilis ábrázoláshoz  $M_\beta(\mathbf{r})$  kifejtésében. Tegyük fel, hogy a vektorindex figyelembevételével ezek a  $c$ -k azonos irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódnak. Az  $f_1^{(2)}(c_{j\alpha}^{(h)})$  és  $f_2^{(2)}(c_{j\beta}^{(i)})$  tiszta másodrendű invariánsokon kívül meghatározva az  $f^{(2)}(c_{j\alpha}^{(h)}, c_{j\beta}^{(i)})$  vegyes másodrendű invariánst, a szabad energia kifejezése így írható:

$$\Phi = \Phi_0 + A_1 f_1^{(2)}(c_{j\alpha}^{(h)}) + A_2 f_2^{(2)}(c_{j\beta}^{(i)}) + \alpha f^{(2)}(c_{j\alpha}^{(h)}, c_{j\beta}^{(i)}) + \dots \quad (\text{V. 1.1})$$

Tegyük fel továbbá, hogy  $\alpha$  sokkal kisebb, mint  $A_1$ , ill.  $A_2$ , vagyis tételezzük fel, hogy a vegyes invariáns által leírt energiajárulék legyen kicsi a kicserélődési kölcsönhatásból származó energiajárulékhoz képest. Ez igaz lesz, ha ez a tag egy relativiztikusan kicsi Dzsyalosinszkij—Moriya kölcsönhatásnak, anizotrópia energiának vagy egy igen gyenge kicserélődési kölcsönhatásnak felel meg. Ezekben az esetekben a vegyes invariánst perturbációsan vehetjük figyelembe.

A vegyes invariánst elhagyva, a szabadenergia minimalizálásával kapott egyenletrendszer megoldva, a (IV. 1) fejezetben mondottak szerint két egymásutáni fázisátalakulás játszódhat le  $T_1$ , ill.  $T_2$  hőmérsékleten, melyekre igaz, hogy  $A_1(T_1) = 0$  és  $A_2(T_2) = 0$  vagy  $A_1(T_2) = 0$  és  $A_2(T_1) = 0$ . Az első esetet nézve  $T_1$  alatt a  $c_{j\alpha}^{(h)}$  együtthatók zérustól különböző értékeket vesznek fel,  $c_{j\beta}^{(i)}$  viszont továbbra is zérus.  $T_2$  alatt már  $c_{j\beta}^{(i)}$  is véges értéket vesz fel. A kétfajta  $c$  együttható különböző mágneses szerkezetet írhat le, pl. két alrácson kristálynál az egyik az egyik alrácson, míg a másik a második alrácson ad momentumot, esetleg különböző irányú momentumkomponensek megjelenését írják le. Mind a  $T_1$ , mind pedig a  $T_2$  hőmérsékleten megjelenik a fajhőben és a szuszceptibilitásban anomália a fázisátalakulás következtében. Vegyük most figyelembe az eddig elhanyagolt gyenge kölcsönhatást. A vegyes tag következtében a  $c_{j\alpha}^{(h)}$  együtthatókkal együtt a  $c_{j\beta}^{(i)}$  együtthatók is zérustól különböző értéket vesznek fel már  $T_1$  alatt, vagyis már ekkor szuperponált mágneses szerkezet alakul ki. A mágnesezettség két komponensének szimmetriája azonos, ezért jelenhetnek meg egy fázisátalakulás során. Az  $\alpha/A \ll 1$  feltétel miatt  $c_{j\beta}^{(i)}$  sokkal kisebb



10. ábra.  $c_{j\alpha}^{(h)}$  és  $c_{j\beta}^{(i)}$  hőmérsékletfüggése a vegyes invariáns figyelembevételével, ill. anélkül

lesz, mint  $c_{j\alpha}^{(h)}$ .  $T_2$  alatt már nem jelenik meg új mágneses komponens, de érvényét veszti a komponensek nagyságrendi különbségére vonatkozó kijelentés. A 10. ábra mutatja  $c$ -k vázlatos hőmérsékletfüggését.

A termodinamikai mennyiségek (fajhő, szuszceptibilitás) pontos vizsgálatára a Landau-elmélet nem alkalmas, ezért itt nem fogunk kvantitatív eredményeket



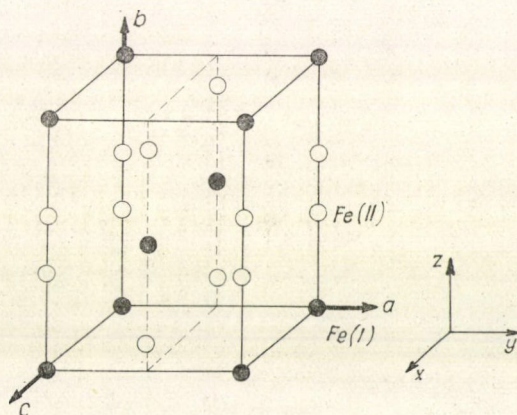
közölni a  $T_2$  körüli viselkedésre. Kvalitatíve viszont a következőket mondhatjuk. Nulladik közelítésben  $T_1$ -nél és  $T_2$ -nél másodrendű fázisátalakulás játszódik le, a szuszeptibilitásban és a fajhőben végtelen maximum jelenik meg, mely a mágneses momentum gyors növekedésével és a fluktuációkkal kapcsolatos. A perturbáció figyelembevétele módosítani fogja ezt a képet, de nem túl drasztikusan. Azt várjuk, hogy ha a perturbáló kölcsönhatás nagyon gyöngye, akkor  $T_2$ -nél továbbra is megmarad a fajhőben és szuszeptibilitásban egy maximum, csak egy kicsit kiszélesedik és nem nő a végtelenbe. A 10. ábrából láthatóan ezek a maximumok a  $T_2$  alatt gyorsan növekedni kezdő mágneses komponens következményei.

A fentiekből következik, hogy a fajhő és szuszeptibilitás hőmérsékletfüggésében akkor is megfigyelhető maximum, amikor nem is játszódik le fázisátalakulás, csak egy már meglevő, de kis mágneses komponens erősebben növekedni kezd. Ezt a jelenséget nevezzük „kvázi-fázisátalakulásnak”.

## 2. A vivianit szerkezete és fázisátalakulásai

Forstát és munkatársai [39] a vivianit ( $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ) fajhőjét vizsgálva azt találták, hogy 12,4 °K-nél és 9,6 °K-nél két éles csúcs jelenik meg, 3 °K táján pedig egy igen elkenet csúcs. A 4,2 °K-en elvégzett NMR mérésből [40] ismeretes volt, hogy a vivianitban két nem ekvivalens vas-pozíció van és azokon az effektív tér különböző hőmérsékletfüggést mutat. Ezért a két fajhőcsúcsot úgy értelmezték, hogy azok a két alrácson egymás után bekövetkező mágneses rendeződésnek felelnek meg. A továbbiakban a vivianitban lejátszódó fázisátalakulásokat vizsgáljuk.

A vivianit ( $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ) monoklin rendszerben kristályosodik, tércsoportja  $C_{2h}^3$  ( $C2/m$ ), szimmetriaelemei  $h_1$ ,  $h_4$ ,  $h_{25}$  és  $h_{28}$ . (A koordináta-rendszer  $y$  és  $z$  tengelyét a kristályban a szokásos választásnak megfelelően  $a$ , ill.  $b$ -vel jelöljük.) A bázislap-centrált cellában a két-fajta vasatom elhelyezkedését a 11.



11. ábra.  $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ -ban a két fajta vasatom elhelyezkedése

ábra mutatja. Az NMR mérésekből ismeretes [41], hogy vagy a csúcson és lapközépen elhelyezkedő I. típusú vasionok antiferromágnesesen vannak csatolva és a II. típusú ionpárok is antiferromágnesesen csatolódnak (a páron belül a momentumok paralelek), vagy pedig az  $(ab)$  síkon belül a momentumok paralelek, de a  $c$  irányban az egymásutáni síkok antiferromágnesesen csatolódnak. Az első esetet fogjuk most részletesebben vizsgálni, a másik esetben is hasonló következtetéseket lehetne egy kvázi-fázisátalakulás lehetőségéről levonni.

A  $(000)$ ,  $\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right)$ ,  $\pm(0b0)$  és  $\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right) \pm(0b0)$  pontokban ülő ionok mág-



neses momentumát rendre  $S_1, S_2, \dots, S_6$ -tal jelölve a fentiekből következik, hogy  $S_1 = -S_2, S_3 = S_4 = -S_5 = -S_6$ . A már korábban is alkalmazott módszerrel a  $c_{xi}$  együtthatók helyett ezek transzformációs tulajdonságait vizsgáljuk. Az NMR mérésekből még az is következik, hogy a momentum az  $(ac)$ , vagyis  $(x, y)$  síkban van, ezért elég ezeket a komponenseket vizsgálni.

$$\begin{array}{ccccc}
 & h_1 & h_4 & h_{25} & h_{28} \\
 S_{1, xy} & 1 & -1 & 1 & -1 \\
 S_{3, xy} & 1 & -1 & 1 & -1
 \end{array} \quad (V. 2.1)$$

A szabadenergia kifejezése másodrendig így írható:

$$\begin{aligned}
 \Phi = \Phi_0 &+ A_1 S_{1x}^2 + A_2 S_{1y}^2 + A_3 S_{1x} S_{1y} + \\
 &+ B_1 S_{3x}^2 + B_2 S_{3y}^2 + B_3 S_{3x} S_{3y} + \\
 &+ \alpha_1 S_{1x} S_{3x} + \alpha_2 S_{1y} S_{3y} + \alpha_3 S_{1x} S_{3y} + \alpha_4 S_{1y} S_{3x} + \dots
 \end{aligned} \quad (V. 2.2)$$

Az első három tag az első alrács atomjai közötti kicserélődési kölcsönhatásnak és anizotrópiának felel meg, a másik három tag a második alrács kicserélődési, anizotrópia energiáját írja le, végül az utolsó négy tag a két alrács közötti kicserélődést és anizotrópiát. Az (V. 1) fejezetben általánosan elmondottakat itt alkalmazva azt kapjuk, hogy a  $4,2^\circ\text{K}$ -en megfigyelt mágneses szerkezet egy fázisátalakulással is kialakulhat, hiszen a vegyes invariánsok létezése miatt már egy másodrendű tag együtthatójának negatívvá válásakor megjelenhet mindkét alrácson mágneses momentum. Ugyancsak a vegyes invariánsok jelenléte miatt viszont lehetőség van kvázi-fázisátalakulásra is. A megfigyelt két fajhőcsúcs tehát egy másodrendű fázisátalakulásnak és egy kvázi-fázisátalakulásnak lehet a következménye [38].

A két fajhőcsúcsot másképpen is lehet értelmezni. Feltehetjük, hogy két valódi másodrendű fázisátalakulás játszódik le, de akkor a mágneses szerkezetnek különböznie kell az NMR mérésben észlelt szerkezettől. *Van den Handel* és munkatársai [42] úgy magyarázta a fajhőcsúcsokat, hogy a magasabb hőmérsékleten levő fajhőcsúcs a rövid hatótávolságú rend fellépésének felel meg, és az alacsonyabb hőmérsékleten levő csúcsok felelnek meg a hosszú hatótávolságú rendnek. Ennek a kérdésnek az eldöntésére további vizsgálatok szükségesek.

### Összefoglalás, következtetések

A dolgozatban a másodrendű fázisátalakulások Landau elméletének néhány alkalmazását és általánosítását vizsgáltuk. A paramágneses fázisból másodrendű fázisátalakulással létrejövő mágneses szerkezetek szimmetriájára vonatkozó kikötések segítségével meghatároztuk néhány a KFKI Szilárdtestfizikai Laboratóriumában kísérletileg is vizsgált anyagban a mágneses momentum lehetséges irány szerinti eloszlását. A mangánalapú ötvözeteknél az ilyen típusú számolások segítették a neutron-diffrakciós mérések kiértékelését. A  $\text{Fe Ge}_2$  mágneses szerkezetét vizsgálva megállapítottuk, hogy az egyes méréseknél észlelt „gyenge” ferromágnesség szennye-



zések következtében lépett fel és nincs köze a Dzjalosinszkij—Moriya-féle gyenge ferromágnességhez. Megmutattuk, hogy az egykristály mérésekből kapott nem kollineáris mágneses szerkezet nem jöhet létre a paramágneses fázisból egy másodrendű fázisátalakulással.

Az elméletet több, egymás után bekövetkező másodrendű fázisátalakulás esetére általánosítva megvizsgáltuk, hogy milyen szerkezetek alakulhatnak ki. Olyan szerkezetek szuperponálódhatnak, melyek külön-külön is megjelenhetnének a paramágneses fázisból. Ha lényeges rácsállandó torzulás lép fel, akkor viszont az első fázisátalakulás után alacsonyabb szimmetriával kell ismételni a számolást. A  $\text{MnSO}_4$  mágneses szerkezetét vizsgálva megállapítottuk, hogy a leírt szerkezet másodrendű fázisátalakulásokkal három egymásutáni lépésben alakulhatott csak ki. Az így kapott szerkezet azonban valamivel általánosabb, mint a mérések alapján leírt. A kúpos spirál szerkezetben az  $(x, y)$  síkbeli oszcilláló komponensek különböző amplitúdójúak és ezért elliptikus szerkezetet adnak. A nemrég elvégzett fajhő-mérések alátámasztani látszanak azt az eredményt, hogy a  $\text{MnSO}_4$ -ben több fázisátalakulás játszódik le. További, elsősorban neutrontdiffrakciós vizsgálatokra lenne szükség, hogy tisztázzni lehessen az egyes fázisok természetét.

Végül felhívtuk a figyelmet arra, hogy mágneses anyagokban, ahol a rendezőparaméter vektormennyiség, a rendeződésnek egy új fajtája következhet be, melyet kvázi fázisátalakulásnak neveztünk. A fajhő és szuszceptibilitás hőmérsékletfüggésében ez a kvázi fázisátalakulás maximumot eredményez, a rendszer szimmetriájában azonban nem történik változás, csak egy korábban kis értéket felvevő mágneses momentum komponens kezd erősebben növekedni. Példaként a vivianit szerkezetét vizsgáltuk. A vivianit kísérletileg megfigyelt mágneses szerkezete ugyanis egy másodrendű fázisátalakulással is létrejöhet, tehát a fajhő két megfigyelt maximuma közül az egyik valódi, a másik kvázi-fázisátalakulásnak felel meg. Alternatív magyarázat is létezik egy rövid hatótávolságú rend kialakulásától származó fajhő-maximum feltételezésével. Itt is további vizsgálat szükséges, hogy dönteni lehessen a két magyarázat között.

### Köszönetnyilvánítás

A szerző köszönettel tartozik *Pál Lénárd* akadémiai levelező tagnak, aki a szerző figyelmét a másodrendű fázisátalakulások Landau-elmélete felé fordította és aki állandó érdeklődésével és megjegyzéseivel értékes segítséget nyújtott. Köszönetemet fejezem ki *Zawadowski Alfréd*nak, a fizikai tudományok doktorának, *Hargitai Csaba* és *Krén Emil* tudományos munkatársaknak hasznos tanácsaikért és a velük folytatott diszkusszióikért, valamint néhány, kísérleti szempontból érdekes probléma felvetéséért.

### IRODALOM

1. *L. Néel*, Ann. de Phys. 17, 61, 1932.
2. *L. D. Landau*, Sow. Phys. 4, 675, 1933.
3. *J. M. Luttinger, L. Tisza*, Phys. Rev. 70, 954, 1946.
4. *D. H. Lyons, T. A. Kaplan*, Phys. Rev. 120, 1580, 1960.
5. *R. A. Tahir-Kheli, H. B. Callen, H. Jarett*, J. Phys. Chem. Solids 27, 23, 1966.
6. *L. D. Landau, E. M. Lifshitz*, Statistical Physics, Pergamon Press, London 1958.
7. *J. Dzyaloshinsky*, J. Phys. Chem. Solids 4, 241, 1958.



8. G. Ja. Lyubarskii, *The Application of Group Theory in Physics*, Pergamon Press, Oxford, 1960.
9. *International Tables for X-Ray Crystallography*, Vol. I., The Kynoch Press, Birmingham, 1952.
10. O. V. Kovaljev, *Irreducible Representations of the Space Groups*, Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1965.
11. L. D. Landau, *Sov. Phys.* 11, 545, 1937.
12. V. L. Ginzburg, *Fiz. Tverdogo Tela* 2, 2031, 1960.
13. E. M. Lifshitz, *Zh. Eks. Teor. Fiz.* 11, 255, 269, 1941.
14. J. E. Dzyaloshinsky, *Zh. Eks. Teor. Fiz.* 32, 1547, 1957. 33, 1454, 1957.
15. O. V. Kovaljev, *Fiz. Tverdogo Tela* 5, 3156, 1963.
16. J. E. Dzyaloshinsky, *Zh. Eks. Teor. Fiz.* 46, 1420, 1964.
17. E. Krén, G. Kádár, L. Pál, J. Sólyom, T. Tarnóczy, *Phys. Rev.* 171, 574, 1968.
18. G. E. Bacon, I. W. Dunmur, J. H. Smith, R. Street, *Proc. Roy. Soc. A* 241, 223, 1957.
19. J. S. Kowel, J. S. Kasper, *Proc. Int. Conf. on Magnetism*, Nottingham, 1964.
20. S. S. Sidhu, K. D. Anderson, D. D. Zaubers, *Bull. Am. Phys. Soc.* 10, 352, 1965.
21. E. Krén, G. Kádár, L. Pál, J. Sólyom, P. Szabó, *Phys. Letters*, 20, 331, 1966.
22. G. E. Bacon, *Proc. Phys. Soc.* 79, 938, 1962.
23. J. S. Kasper, J. S. Kowel, *J. Phys. Chem. Solids* 11, 231, 1959.
24. J. S. Kowel, C. C. Hartelius, L. M. Osika, *J. Appl. Phys.* 34, 1095, 1963.
25. A. F. Andersen, A. Kjekshus, R. Møllerud, W. B. Pearson, *Phil. Mag.* 11, 1245, 1965.
26. E. Krén, J. Sólyom, *Phys. Letters* 22, 273, 1966.
27. K. Yasukochi, K. Kanematsu, T. Ohoyama, *J. Phys. Soc. Japan* 16, 429, 1961.
28. G. Airoldi, R. Pauthenet, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 258, 3994, 1964.
29. J. B. Forsyth, C. E. Johanson, P. J. Brown, *Phil. Mag.* 10, 713, 1964.
30. E. Krén, P. Szabó, *Phys. Letters* 11, 215, 1964.
31. N. S. Satya Murthy, R. J. Begum, C. S. Somanathan, M. R. L. N. Murthy, *Solid State Comm.* 3, 113, 1965.
32. E. F. Bertaut, J. Chenavds, *Solid State Comm.* 3, 117, 1965.
33. J. Sólyom, E. Krén, *Solid State Comm.* 4, 255, 1966.
34. J. Sólyom, *Physica*, 32, 1243, 1966.
35. G. Will, B. C. Frazer, G. Shirane, D. E. Cox, P. J. Brown, *Phys. Rev.* 140, A 2139, 1965.
36. G. Will, B. C. Frazer, D. E. Cox, *Acta Cryst.* 19, 854, 1965.
37. Y. Allain, J. P. Krebs, J. de Gunzburg, *J. Appl. Phys.* 39, 1124, 1968.  
J. P. Krebs, doktori disszertáció, Rapport CEA-R-3495, 1968.
38. J. Sólyom, *Physica* 32, 2192, 1966.
39. H. Forst, N. D. Love, J. McElearney, *Phys. Rev.* 139, A 1246, 1965.
40. W. Van der Lugt, N. J. Poulis, *Physica* 27, 733, 1961.
41. W. Van der Lugt, *Acta Cryst.* 23, 935, 1967.
42. H. C. Meijer, J. Van den Handel, E. Frikkee, *Physica* 34, 475, 1967.



## Függelék

## 1. Bravais-rács típusok

Szingónia	Típus	Bázisvektorok
triklin $S_2$	primitív $\Gamma_t$	tetszőleges
monoklin $C_{2h}$	primitív $\Gamma_m$	$\mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$
	báziscentrált $\Gamma_m^0$	$\mathbf{a}_3 - \frac{1}{2} \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$
ortorombos $D_{2h}$	primitív $\Gamma_0$	$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1$
	báziscentrált $\Gamma_0^b$	$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_3 - \frac{1}{2} \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_1$
	tércentrált $\Gamma_0^v$	$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_1$
	lapcentrált $\Gamma_0^f$	$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 - \frac{1}{2} \mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_3 - \frac{1}{2} \mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_1$
tetragonális $D_{4h}$	primitív $\Gamma_q$	$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$
	tércentrált $\Gamma_q^v$	$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$
romboéderez $D_{3d}$	primitív $\Gamma_{rh}$	$(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) = \frac{2\pi}{3}, \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$
		$\mathbf{a}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$
hexagonális $D_{6h}$	primitív $\Gamma_h$	$(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) = \frac{\pi}{3}, \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$
köbös $O_h$	primitív $\Gamma_c$	$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3$
	lapcentrált $\Gamma_c^f$	$\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 \perp$ $\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3$
	tércentrált $\Gamma_c^v$	$\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3 \perp \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_1,$ $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3$

## 2. A Kovaljev-féle feltétel bizonyítása

Válasszuk ki az  $M_x(r)$  momentumsűrűségnek azt a részét, mely a  $T^{(k,m)}$  irreducibilis ábrázolás  $\Phi_i^{(k,m)}$  bázisfüggvényeivel írható le:

$$M_x^{(k,m)}(\mathbf{r}) = \sum_i c_{xi}^{(k,m)} \Phi_i^{(k,m)}(\mathbf{r}) \quad (\text{F. 2.1})$$

A  $\Phi_i^{(k,m)}$  bázisfüggvények által kifeszített téren az  $A$  atomhoz tartozó  $\hat{G}'(A)$  pontcsoport is ábrázolható, mégpedig általában már reducibilisen.  $M_x^{(k,m)}(\mathbf{r})$ -nek az a része, mely a kiredukálás után a  $\hat{G}'$  pontcsoport  $T_j(h')$  irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódik, ismert módon [8] így írható:

$$M_{xj} = \sum_{h'} \chi_j(h') T(h') M_x^{(k,m)}(\mathbf{r}) = \sum_{h'} \chi_j(h') M_x^{(k,m)}[(h')^{-1} \mathbf{r}] \quad (\text{F. 2.2})$$

ahol  $\chi_j(h')$  a  $T_j(h')$  ábrázolásban a  $h'$  elem karaktere. Mivel a  $h'$  műveleteket úgy választottuk, hogy a  $\beta$  pontban levő  $A$  atomot hagyják a helyén, ezért

$$M_{xj}(\mathbf{B}) = M_x^{(k,m)}(\mathbf{B}) \sum_{h'} \chi_j(h') \quad (\text{F. 2.3})$$



Az ortogonalitási relációból következően az egységábrázolás kivételével minden irreducibilis ábrázolásra  $\sum_{h'} \chi(h') = 0$  és ezért csak az egységábrázolást adó altérben van  $M_a^{(k,m)}(\beta)$ -nak el nem tűnő komponense. Ahhoz tehát, hogy  $M_a^{(k,m)}(\beta)$  véges értékű legyen, szükséges, hogy a  $T^{(k,m)}$  ábrázolásnak a  $\hat{G}$  pontcsoport  $T_j(h')$  ábrázolása szerinti kiredukálásban az egységábrázolás előforduljon. A karakterekre vonatkozó ortogonalitási reláció felhasználásával pedig azt kapjuk, hogy az egységábrázolás csak akkor fordulhat elő, ha

$$\sum_{\hat{G}(A)} \chi^{(k,m)}(h') \neq 0. \quad (\text{F. 2.4})$$

Az ellenkező esetben, ha ez az összeg zérus, az egységábrázolás nem fordul elő, és az illető rácspontban a  $T^{(k,m)}$  ábrázolás bázisfüggvényei zérus momentumot adnak.

### 3. $\chi^{(k,m)}(h')$ meghatározása

Az ábrázolás csillagának egyik  $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}$  vektorát változtatlanul hagyó elemek, vagyis a  $\mathbf{k}$  vektor kis-csoportja legyen  $h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, \dots, h_n^{(1)}$ . Az ábrázolás csillagának többi vektora legyen  $\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \dots, \mathbf{k}_m$ , a  $\mathbf{k}_s$  vektort  $\mathbf{k}_1$ -ből előállítható transzformáció legyen  $h_1^{(s)}$ , vagyis  $\mathbf{k}_s = h_1^{(s)} \mathbf{k}_1$ .

A kis-csoport egy irreducibilis ábrázolásának bázisfüggvényeit jelöljük  $\Phi_\mu^{(1)}$ -gyel. Az (I.1) fejezetben megmutattuk, hogy ezek segítségével generálni tudjuk a teljes csoportnak egy irreducibilis ábrázolását a következő bázisfüggvényekkel

$$\Phi_\mu^{(s)} = T(g_1^{(s)}) \Phi_\mu^{(1)} \quad \text{ahol} \quad g_1^{(s)} = \{\alpha_1^{(s)} | h_1^{(s)}\} \quad (\text{F. 3.1})$$

és  $\alpha_1^{(s)}$  a tércsoportban a  $h_1^{(s)}$  forgatásos művelethez tartozó transláció. Az (I.1) fejezetben leírt módszer szerint felépítve az ábrázolás mátrixait, meghatározzuk az elemek karakterét.

Egy tetszőleges  $g = \{\alpha | h\}$  elem hatását akarjuk megnézni a  $\Phi_\mu^{(r)}$  bázisfüggvényre. A  $\Phi_\mu^{(r)}$  függvény translációval szembeni viselkedésére jellemző  $\mathbf{k}_r = h_1^{(r)} \mathbf{k}$  vektorhoz keressük meg a  $\mathbf{k}_p = h \mathbf{k}_r$  vektort és az ehhez tartozó  $h_1^{(p)}$  elemet. Ekkor  $h_r = (h_1^{(p)})^{-1} h h_1^{(r)}$   $\mathbf{k}$ -t önmagába viszi át, vagyis beletartozik  $\mathbf{k}$  kis-csoportjába. A tércsoportban a  $h_1^{(p)}$  és  $h_1^{(r)}$  forgatásokhoz tartozó elemek legyenek  $g_1^{(p)} = \{\alpha_1^{(p)} | h_1^{(p)}\}$ , ill.  $g_1^{(r)} = \{\alpha_1^{(r)} | h_1^{(r)}\}$ .

A tércsoport elemeinek szorzási szabálya alapján

$$\begin{aligned} (g_1^{(p)})^{-1} g g_1^{(r)} &= \{\alpha_1^{(p)} | h_1^{(p)}\}^{-1} \{\alpha | h\} \{\alpha_1^{(r)} | h_1^{(r)}\} = \\ &= \{- (h_1^{(p)})^{-1} \alpha_1^{(p)} | (h_1^{(p)})^{-1} \alpha\} \{\alpha + h \alpha_1^{(r)} | h h_1^{(r)}\} = \\ &= \{(h_1^{(p)})^{-1} (\alpha + h \alpha_1^{(r)} - \alpha_1^{(p)}) | (h_1^{(p)})^{-1} h h_1^{(r)}\}. \end{aligned} \quad (\text{F. 3.2})$$

Határozzuk most  $T(g)$ -t  $\Phi_\mu^{(r)}$ -re

$$T(g) \Phi_\mu^{(r)} = T(g_1^{(p)}) T[(g_1^{(p)})^{-1} g g_1^{(r)}] T[(g_1^{(r)})^{-1}] \Phi_\mu^{(r)} = T(g_1^{(p)}) T[(g_1^{(p)})^{-1} g g_1^{(r)}] \Phi_\mu^{(1)}. \quad (\text{F. 3.3})$$

A kis-csoport irreducibilis ábrázolásait ismerve

$$T[(g_1^{(p)})^{-1} g g_1^{(r)}] \Phi_\mu^{(1)} = \sum_{\mu'} \hat{\tau}_{\mu\mu'} [(h_1^{(p)})^{-1} h h_1^{(r)}] \cdot e^{-i\mathbf{k}_1 (h_1^{(p)})^{-1} (\alpha + h \alpha_1^{(r)} - \alpha_1^{(p)})} \Phi_{\mu'}^{(1)}$$

ahol  $\hat{\tau}$  a súlyozott ábrázolás mátrixa. Ez az a mennyiség, amely táblázatokban megtalálható (I. [10]). Visszaírva ezt (F.3.3)-ba

$$\begin{aligned} T(g) \Phi_\mu^{(r)} &= \sum_{\mu'} T(g_1^{(p)}) \hat{\tau}_{\mu\mu'} [(h_1^{(p)})^{-1} h h_1^{(r)}] \cdot e^{-i\mathbf{k}_p (\alpha + h \alpha_1^{(r)} - \alpha_1^{(p)})} \Phi_{\mu'}^{(1)} = \\ &= \sum_{\mu'} \hat{\tau}_{\mu\mu'} [(h_1^{(p)})^{-1} h h_1^{(r)}] e^{-i\mathbf{k}_p (\alpha + h \alpha_1^{(r)} - \alpha_1^{(p)})} \Phi_{\mu'}^{(p)}. \end{aligned} \quad (\text{F. 3.4})$$



Az (F.3.1)-gyel definiált térben valóban a teljes tércsoport egy ábrázolását kaptuk. A  $g$  elem karaktere innen

$$\chi^{(k,m)}(g) = \sum_p \hat{\chi}_k^{(m)} [(h_1^{(p)})^{-1} h h_1^{(p)}] e^{-ik_p(\alpha + h\alpha_1^{(p)} - \alpha_1^{(p)})}, \quad (\text{F. 3.5})$$

ahol  $\hat{\chi}_k^{(m)}$  a súlyozott ábrázolás karaktere és a szummát olyan  $k_p$  vektorokra kell elvégezni, melyekre  $h k_p \equiv k_p$ .

A  $h' = \{\beta - h\beta/h\}$  karakterét ily módon meghatározva

$$\chi^{(k,m)}(h') = \sum_{k_p \equiv h k_p} \hat{\chi}_k^{(m)} [(h_1^{(p)})^{-1} h h_1^{(p)}] \cdot e^{i(h^{-1}k_p - k_p)(\beta - \alpha_1^{(p)})}. \quad (\text{F. 3.6})$$

#### 4. A szimmetriaműveletek jelölése

$h_1 = (x, y, z)$	egységtranszformáció
$h_2 = (x, \bar{y}, \bar{z})$	180°-os forgatás [100] körül
$h_3 = (\bar{x}, y, \bar{z})$	180°-os forgatás [010] körül
$h_4 = (\bar{x}, \bar{y}, z)$	180°-os forgatás [001] körül
$h_5 = (y, z, x)$	240°-os forgatás [111] körül
$h_6 = (y, \bar{z}, \bar{x})$	120°-os forgatás [11 $\bar{1}$ ] körül
$h_7 = (\bar{y}, z, \bar{x})$	120°-os forgatás [ $\bar{1}$ 11] körül
$h_8 = (\bar{y}, \bar{z}, x)$	120°-os forgatás [1 $\bar{1}$ 1] körül
$h_9 = (z, x, y)$	120°-os forgatás [111] körül
$h_{10} = (z, \bar{x}, \bar{y})$	240°-os forgatás [1 $\bar{1}$ 1] körül
$h_{11} = (\bar{z}, x, \bar{y})$	240°-os forgatás [11 $\bar{1}$ ] körül
$h_{12} = (\bar{z}, \bar{x}, y)$	240°-os forgatás [ $\bar{1}$ 11] körül
$h_{13} = (\bar{y}, \bar{x}, \bar{z})$	180°-os forgatás [ $\bar{1}$ 10] körül
$h_{j+12} = h_j \cdot h_{13}$	jobbról szorozzuk $h_{13}$ -mal
$h_{14} = (\bar{y}, x, z)$	90°-os forgatás [001] körül
$h_{15} = (y, \bar{x}, z)$	270°-os forgatás [001] körül
$h_{16} = (y, x, \bar{z})$	180°-os forgatás [110] körül
$h_{17} = (\bar{x}, \bar{z}, \bar{y})$	180°-os forgatás [0 $\bar{1}$ 1] körül
$h_{18} = (\bar{x}, z, y)$	180°-os forgatás [011] körül
$h_{19} = (x, \bar{z}, y)$	90°-os forgatás [100] körül
$h_{20} = (x, z, \bar{y})$	270°-os forgatás [100] körül
$h_{21} = (\bar{z}, \bar{y}, \bar{x})$	180°-os forgatás [ $\bar{1}$ 01] körül
$h_{22} = (\bar{z}, y, x)$	270°-os forgatás [010] körül
$h_{23} = (z, \bar{y}, x)$	180°-os forgatás [101] körül
$h_{24} = (z, y, \bar{x})$	90°-os forgatás [010] körül
$h_{25} = (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$	az inverzió és $h_{24+k} = h_k \cdot h_{25} = h_{25} \cdot h_k$
$h_{25} = (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$	$h_{37} = (y, x, z)$
$h_{26} = (\bar{x}, y, z)$	$h_{38} = (y, \bar{x}, \bar{z})$
$h_{27} = (x, \bar{y}, z)$	$h_{39} = (\bar{y}, x, \bar{z})$
$h_{28} = (x, y, \bar{z})$	$h_{40} = (\bar{y}, \bar{x}, z)$
$h_{29} = (\bar{y}, \bar{z}, \bar{x})$	$h_{41} = (x, z, y)$
$h_{30} = (\bar{y}, z, x)$	$h_{42} = (x, \bar{z}, \bar{y})$
$h_{31} = (y, \bar{z}, x)$	$h_{43} = (\bar{x}, z, \bar{y})$
$h_{32} = (y, z, \bar{x})$	$h_{44} = (\bar{x}, \bar{z}, y)$
$h_{33} = (\bar{z}, \bar{x}, \bar{y})$	$h_{45} = (z, y, x)$
$h_{34} = (\bar{z}, x, y)$	$h_{46} = (z, \bar{y}, \bar{x})$
$h_{35} = (z, \bar{x}, y)$	$h_{47} = (\bar{z}, y, \bar{x})$
$h_{36} = (z, x, \bar{y})$	$h_{48} = (\bar{z}, \bar{y}, x)$



# KÖNYVISMERTETÉS

Becker—Sauter: THEORIE DER ELEKTRIZITÄT. I—III. kötet.

B. G. Teubner. Stuttgart. 1970.

Az elektromosság elmélete sohasem lesz lezárt tudomány. A kb. 75 éve A. Föppl-től megjelent Einführung in die Maxwellsche Theorie M. Abraham, majd L. Becker által végrehajtott átdolgozása után most Fritz Sauter kölni professzor szerkesztésében három kötetben jelent meg újra.

Sauter átdolgozása az I. kötetet illetően a terjedelem korlátozása érdekében egyes helyeken rövidített, másokat megváltoztatott. Így vált lehetővé új fejezetek beiktatása, ill. egyesek új szempontok szerinti tárgyalása. Így történt például a dipolusok és kvadrupolusok, valamint sugárzási terük, ill. külső terekben a dipolusokra és a kvadrupolusokra ható erők megtárgyalásánál. Lényegesen megváltozott az energia viszonyokat és az erőhatásokat statikus terekben tárgyaló fejezet; a Lorentz-erő pedig mint tapasztalati tény a mágneses térben fellépő erőhatások tárgyalásának kiindulópontja lett. A Sauter-féle átdolgozás továbbra is a Gauss-féle CGS-rendszert használja, de helyenként a legfontosabb képleteket megadja a Giorgi-féle MKS rendszerben is. Mivel az elektrodinamika képletei a két rendszerben sok esetben különböznek, pontosabban az azonos megnevezés ellenére a Gauss-rendszerben megadott mennyiségek a Giorgi-rendszerben nekik megfelelő mennyiségektől lényegesen különbözöt jelentenek, az utóbbi esetben a megfelelő mennyiségeket a jobb oldalon felső index helyére tett \* jelöléssel különbözteti meg.

A Theorie der Elektrizität II. kötete az elektronok és a sugárzások kvantumelméletével foglalkozik. A tárgyalás közben két szempontot tart szem előtt. Először is azt, hogy a tárgyalás ha nem is teljes, de önmagában zárt legyen. Ezért fordít gondot a kvantummechanika matematikai alapjaira, beleértve a Hilbert-tér elméletének áttekintését is. E kötetnek másik alap gondolata lerakni az alapokat a harmadik kötet anyagához: az anyagnak az elektromágneses térben való viselkedését illetően.

E kötet megértéséhez csak a klasszikus elméleti fizika alapismeretei szükségesek. Az elektron klasszikus viselkedésének rövid összefoglalását a kvantumelméleti alapok részletes kidolgozása követi. Ez után kerül sor ennek alkalmazására az egy és több elektronos problémák esetén. A kvantum térelmélet alapjainak tárgyalása zárja le a kötetet, a Maxwell-féle térelmélet kvantumelmélete és az elektron Dirac-féle térelméletének ismertetésével.

A harmadik, a szakemberektől már évek óta nagy érdeklődéssel várt kötet mellékelt — a másik kettőnél nincs ilyen — sajtóhibajegyzék remélhetőleg semmiféle összefüggésben nincs azzal, hogy a nyomtatást a budapesti Franklin Nyomda végezte el. — A kötet feladatát: az anyagban végbemenő elektromágneses jelenségek tárgyalását szolgálta az I—II. kötet számos átdolgozása, különösen a II. kötet 10. kiadásának G. Leibfried és W. Brenig részéről 1969-ben történő újabb átdolgozása. Az így előkészített III. kötet az összefüggő anyag elektrodinamikájának problémáját felvázolva tér át az anyag elektromos és optikai, majd a mágneses sajátosságaira, majd ezt követően a szilárd testek elektromos vezetésére és végül a plazmafizika egyes kiválasztott problémáira, mint a fémek elektronplazmájára, az elektrolitek elméletére és egyes, a gázplazmák esetén és a magneto-hidrodinamikában fellépő problémák tárgyalására.

Minden kötethez a fejezetek végén több feladat csatlakozik, amelyek megoldása megtalálható a kötet végén. Ennek célja, hogy az olvasónak megkönnyítse a tárgyalt anyagba való behatolást, amennyiben lehetőséget ad konkrét problémák megoldására és annak megállapítására, hogy az olvasottak valóban világosakká váltak-e vagy sem. E feladatokban kerülnek — mintegy rejtve — tárgyalásra egyes fontos alkalmazások úgy, hogy ajánlatos a feladatok megoldását mindenképpen, akár külön tanulmányként elvégezni.

(T. Gy.)



# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## A SZÍNKÉPEK NÉHÁNY TULAJDONSÁGÁNAK ÉRTELMEZÉSÉRŐL A PÖRGŐ ELEKTRON KVANTUMMECHANIKÁJA ALAPJÁN\*

NEUMANN JÁNOS és WIGNER JENŐ

Tetszőleges, pörgő elektronokból álló rendszer kinematikai tulajdonságait a spin Pauli által megadott képe alapján (minden további feltevés nélkül) a Dirac—Jordan-féle transzformációelmélet segítségével vezetjük le.

*Bevezetés.* Ennek a munkának az a célja, hogy a pörgő elektron W. Pauli által megadott leírását<sup>1</sup> bizonyos spektroszkópiai szabályosságok értelmezésére alkalmazza. A módszert a szerzők egyike korábban már felhasználta a spektroszkópiai tapasztalatoknak a kvantummechanikából (a pörgő elektron nélkül!) való leszámaztatására.<sup>2</sup> A módszer valamennyi atomi rendszer közös elemi szimmetriatulajdonságainak — nevezetesen az elektronok azonosságának és a térbeli irányok egyenértékűségének (ezt az utóbbit fogjuk főként felhasználni) — kihasználásán alapszik; a célnak megfelelő matematikai segédeszköz az ún. ábrázoláselmélet.

Munkánk felépítése a következő: ebben a cikkben a pörgő elektron (ill. több pörgő elektronból álló rendszer) kinematikáját levezetjük Pauli kvalitatív alapgondolatából. A munkánk folytatását képező másik cikkünkben majd ezt alkalmazzuk a spektroszkópia azon törvényszerűségeire, amelyek az elektron mágneses kölcsönhatásainak figyelembevétele mellett szigorúan érvényesek. Egy harmadik cikkben végül azokat a szabályszerűségeket tárgyaljuk majd, amelyek csak akkor érvényesek, ha ezeket a kölcsönhatásokat elhanyagoljuk.

Annak mentségéül, hogy a pörgő elektron ismert<sup>3</sup> kinematikáját itt még egyszer teljes részletességgel tárgyaljuk, azt szeretnénk felhozni, hogy azt eddig mindenkor speciális feltevések segítségével nyerték. Pauli az impulzuszórák Heisenberg —Born—Jordan-féle képleteivel<sup>4</sup> való analógia alapján dolgozta ki azt, Jordan pedig a kanonikusan konjugált mennyiségekre vonatkozó elméletének alkalmazásával. Most azt kívánjuk kimutatni, hogy az elmélet levezethető a Dirac—Jordan-féle transzformációelmélet alapján<sup>5</sup> minden további feltevés nélkül, ha a bevezetőben

\* ZS. f. Phys. **47**, 203, 1928.

<sup>1</sup> ZS. f. Phys. **43**, 601, 1927.

<sup>2</sup> E. Wigner, uo. **43**, 624, 1927; **45**, 601, 1927.

<sup>3</sup> Vö. az <sup>1</sup> lábjegyzettel, valamint P. Jordan, ZS. f. Phys. **44**, 21—25, 1927, 6. §.

<sup>4</sup> ZS. f. Phys. **35**, 557, 1926, 4. §.

<sup>5</sup> P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **112**, 661, 1926 és **113**, 621—641, 1927; P. Jordan, ZS. f. Phys. **40**, 809, 1927 (I) és **44**, 1, 1927 (II). Ezen elmélet bizonyos részei megtalálhatók már F. London munkáiban (ZS. f. Phys. **37**, 915, 1926 és **40**, 193, 1926). Vö. még J. v. Neumann, Gött. Nachr., Sitzung vom 20. Mai 1927. — Az elmélet fizikai értelme a legvilágosabban W. Heisenberg munkájában tárol elénk (ZS. f. Phys. **43**, 172, 1927).



említett elveket (az összes elektron és az összes térirány egyenértékűségét) következetesen figyelembe vesszük.

Ezzel kapcsolatban talán nem haszontalan arra rámutatni, hogy milyen erő lakozik ezekben (és más hasonló) szimmetria- (vagy invariancia-) elvekben: természettörvények nyomára vezetnek bennünket. Ebben az esetben pl. ily módon a pörgő elektron Pauli-féle kvalitatív képe alapján egyértelműen és kényszerítő erővel az atomszinképek szabályszerűségeihez jutunk. Mindez hasonlít az általános relativitáselmélethez, ahol egy invarianciaelv lehetővé tette az univerzális természet-törvények felkutatását.

## I. Előkészületek

1. A következő megfontolások kerete, mint már említettük, a kvantummechanika Dirac—Jordan-féle transzformáció-elmélete. Eszerint valamely rendszer jelen állapotának meghatározása egy „maximális kísérlet” útján történik; ez azt jelenti, hogy bizonyos számú szimultán mérést végzünk, melyeknek az a természete, hogy eredményeiket minden további kísérlet (melyben a már megmért mennyiségek által meg nem határozott mennyiséget mérünk) szükségszerűen megzavarja.<sup>6</sup> Ilyen „maximális kísérlet” pl. (egy tömegpont esetében) valamennyi Descartes-koordináta mérése, vagy valamennyi velük konjugált impulzusé, vagy (ha az nem elfajult) az energiáé egymagában stb. A kísérletben megmért mennyiségek határozzák meg a „koordinátarendszert”, lehetséges értékeik pedig az „állapotteret”. A rendszer tetszőleges „állapotát” tehát oly módon írhatjuk le, hogy minden ponthoz (azaz a maximális kísérlet lehetséges eredményeinek mindegyikéhez) egy-egy komplex számot rendelünk: az a (komplex értékű) függvény, mely az „állapotterén” van értelmezve, a „hullámfüggvény”; abszolút értékének négyzete annak valószínűsűrűségét adja meg, hogy a rendszer — az említett „maximális kísérlet” majdani eredményének tanúsága szerint — az „állapotter” szóban forgó pontjában található. A „hullámfüggvény” fázisainak kevésbé közvetlen az értelmezése; ez csak a „koordinátarendszer” által meg nem határozott — és vele egyidejűleg nem mérhető — mennyiségek mérésekor, valamint a rendszer időbeli állapotváltozása folyamán jut érvényre.<sup>7</sup> Különböző két hullámfüggvény, melyek pusztán állandó tényezőben különböznek egymástól, a rendszer ugyanazon állapotát határozza meg; egyébként azonban különböző hullámfüggvényekhez különböző állapotok tartoznak.

Minden (mérhető) fizikai mennyiséghez egy-egy (hermitikus-) szimmetrikus és lineáris funkcionáloperátor tartozik, mely, ha azt egy „hullámfüggvényre” alkalmazzuk, abból egy másikat csinál<sup>8</sup> A koordinátáknak választott mennyiségekhez

<sup>6</sup> Ismeretes, hogy a kvantummechanikában alapvető kérdés: elvégezhető-e két mérés egyidejűleg (anélkül, hogy zavarnák egymást), vagy sem.

<sup>7</sup> A hullámfüggvény e része sincs egyértelműen meghatározva, míg további (a „koordinátarendszer” választásán túlmenő) követelményeket nem támasztunk. Vö. P. Jordan, i. m. (II) és J. v. Neumann, i. m.

<sup>8</sup> A  $T$  operátor (mely az  $f$  függvényt a  $Tf$  függvénybe viszi át), lineáris, ha

$$T(af) = aTf, \quad T(f+g) = Tf + Tg$$

( $a$  = állandó,  $f$  és  $g$  = „hullámfüggvények”); az operátor szimmetrikus voltát illetően vö. Jordan elsőként említett munkájával vagy v. Neumann dolgozatával, melyeket az <sup>5</sup> lábjegyzetben idéztünk. Itt nem tárgyaljuk, hogy a  $T$  operátor ismerete miként adja meg a megfelelő mennyiség statisztikáját; közelebbit lásd az idézett helyeken.



tartozó operátorok minden „hullámfüggvényt” az „állapotér” megfelelő koordinátájával szoroznak meg.

Valamely fizikai mennyiség azokat és csak azokat az értékeket veheti fel, amelyek az őhöz tartozó operátornak sajátértékei.

2. Vegyünk most szemügyre egy  $n$  elektronból álló rendszert,<sup>9</sup> melynek Goudsmit—Uhlenbeck-féle spinjét — a Pauli-féle értelemben — tekintetbe kívánjuk venni. Miképpen végezhetünk ezen a rendszeren „maximális kísérletet”? Először is mindenestre megmérhetjük az  $n$  elektron valamennyi  $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$  Descartes-koordinátáját, majd Paulit követve bekapcsolhatunk egy igen erős  $+Z$ -irányú mágneses teret: ez az összes elektron  $+Z$ - vagy  $-Z$ -irányú orientációját eredményezi. A „maximális kísérlet” tehát az összes Descartes-koordináta, valamint a  $+Z$ -irányú spinek méréséből áll, valamennyi elektronra vonatkozóan:  $x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n$ .<sup>10</sup>

Az  $x_1, \dots, z_n$  koordináták  $-\infty$ -tól  $+\infty$ -ig minden értéket felvehetnek; az  $s_1, \dots, s_n$  változók a  $\pm 1$  értékeket vehetik fel. A „hullámfüggvények” így a

$$\varphi(x_1, \dots, z_n; s_1, \dots, s_n)$$

alakúak, ahol a pontosvessző mögött csupa  $\pm$  áll, itt tehát  $2^n$  számú, egyedül a Descartes-koordinátától függő függvénnyel van dolgunk, melyeket a következőképpen is jelölhetünk:

$$\varphi_{s_1, \dots, s_n}(x_1, \dots, z_n)$$

(„spinmentes hullámfüggvények”).

3. Legyen  $\xi$  valamely térbeli irány; ekkor a  $v$ -edik ( $v = 1, 2, \dots, n$ ) elektron spinjének  $\xi$ -irányú komponense egy fizikai mennyiség, melyhez tehát egy operátornak kell tartoznia, amit jelöljön  $S_{\xi}^{(v)}$ . Az  $S_{+Z}^{(v)}$  operátor a „koordinátarendszerhez” tartozik és így közvetlenül megadható: hatása abban áll, hogy a „hullámfüggvényt” megszorozza az állapotér megfelelő  $s_v$  koordinátájával. Ha tehát  $S_{+Z}^{(v)}\varphi = \psi$ , úgy

$$\varphi_{s_1, \dots, s_n} = \pm \psi_{s_1, \dots, s_n},$$

aszerint, hogy  $s_v = +1$  vagy  $-1$  (itt  $\varphi$  és  $\psi$  „hullámfüggvények”;  $\varphi_{s_1, \dots, s_n}, \psi_{s_1, \dots, s_n}$  a megfelelő „spinmentes hullámfüggvények”).

A többi  $S_{\xi}^{(v)}$  operátor meghatározásához (melyek nem figyelhetők meg a mi „koordinátarendszerünkkel” egyidejűleg) valamivel behatóbb megfontolásokra van szükség: vissza kell nyúlnunk rendszerünk fizikai természetéhez.

Legyen  $\mathfrak{R}$  valamely elforgatás a háromdimenziós térben (a kezdőpont körül), mely az  $x, y, z$  Descartes-koordinátákat az

$$x' = \alpha_{11}x + \alpha_{12}y + \alpha_{13}z,$$

$$y' = \alpha_{21}x + \alpha_{22}y + \alpha_{23}z,$$

$$z' = \alpha_{31}x + \alpha_{32}y + \alpha_{33}z$$

képletekkel megadott  $x', y', z'$  értékekbe viszi át. Minden  $\varphi$  „hullámfüggvény”

<sup>9</sup> Természetesen tetszőleges potenciális és kölcsönhatási energia is jelen lehet; először csak a kinematikával foglalkozunk.

<sup>10</sup> A spineket az egyszerűség kedvéért az  $s = \pm 1$  módon normáljuk  $\left(\pm \frac{hm}{4\pi e}\right)$  helyett.



rendszerünknek valamely állapotát írja le; ha erre az állapotrak alkalmazzuk az  $\mathfrak{R}$  elforgatást, új állapot áll elő, melynek hullámfüggvénye legyen  $\varphi(\mathfrak{R})$ .<sup>11</sup> A

$$\varphi \rightarrow \varphi(\mathfrak{R})$$

hozzárendelés természete fizikai megfontolások alapján könnyen tisztázható. Először is változatlanul kell hagynia a belső szorzat<sup>12</sup> (skalárszorzat) abszolút értékének négyzetét (hiszen  $|\langle \varphi, \psi \rangle|^2$  a  $\varphi$  állapotból a  $\psi$  állapotba vezető átmenet valószínűsége). Innen könnyű arra következtetni, hogy létezik egy  $O_{\mathfrak{R}}$  lineáris ortogonális operátor,<sup>13</sup> úgyhogy mindenkor

$$\varphi(\mathfrak{R}) = O_{\mathfrak{R}} \varphi \quad \text{vagy} \quad = \overline{O_{\mathfrak{R}} \varphi}$$

(a felülvonás a komplex konjugáltat jelenti).<sup>14</sup>

Könnnyen belátható, hogy csak az első eset jön tekintetbe.<sup>15</sup>

<sup>11</sup> Vegyük tekintetbe, hogy  $\varphi(\mathfrak{R})$  pusztán egy egységnyi abszolútértékű állandó tényező erejéig van meghatározva!

<sup>12</sup> Két „hullámfüggvény”,  $f$  és  $g$ , belső szorzata:  $f$ -nek és  $g$  komplex konjugáltjának az egész „állapottérre” kiterjesztett integrálja. A belső szorzatot az  $(f, g)$  szimbólummal jelöljük.

<sup>13</sup> Az  $O$  lineáris operátort ortogonálisnak mondjuk, ha az a belső szorzatot változatlanul hagyja:  $(f, g) = (Of, Og)$ . Vegyük tekintetbe, hogy  $\varphi \rightarrow \varphi(\mathfrak{R})$  először is nem egyértelmű operátor (minthogy  $\varphi(\mathfrak{R})$  csupán egy állandó tényező erejéig van meghatározva), másodsor eleve nem látszik, hogy lineárisnak kell lennie. (Ortogonalis operátorok helyett ma unitér operátorokról beszélünk. A ford. megj.)

<sup>14</sup> Válasszunk ugyanis egy  $\varphi_1, \varphi_2, \dots$  teljes ortonormált függvényrendszert; ekkor  $\varphi_1(\mathfrak{R}), \varphi_2(\mathfrak{R}), \dots$  teljes, ortogonális rendszer és normálnak választható. A belső szorzat abszolút-érték-négyzetének invarianciájából nehézség nélkül következtethetünk: ha

$$\psi = a_1 \varphi_1 + a_2 \varphi_2 + \dots, \quad \psi(\mathfrak{R}) = b_1 \varphi_1(\mathfrak{R}) + b_2 \varphi_2(\mathfrak{R}) + \dots$$

úgy  $|a_1| = |b_1|, |a_2| = |b_2|, \dots$ ; egy  $\psi$  esetén elérhető tehát (a  $\varphi_1(\mathfrak{R}), \varphi_2(\mathfrak{R}), \dots$  függvények alkalmas választásával, anélkül, hogy normálásukon csorba esnék), hogy  $a_1 = b_1, a_2 = b_2, \dots$  legyen; valamennyi  $|a_n|$  legyen  $> 0$ .

A többi

$$\psi' = a'_1 \varphi_1 + a'_2 \varphi_2 + \dots, \quad \psi'(\mathfrak{R}) = b'_1 \varphi_1(\mathfrak{R}) + b'_2 \varphi_2(\mathfrak{R}) + \dots$$

függvényeket szemügyre véve könnyen megmutathatjuk, hogy mindenkor

$$a'_1 = b'_1, a'_2 = b'_2, \dots \quad \text{vagy} \quad a'_1 = \overline{b'_1}, a'_2 = \overline{b'_2}, \dots$$

(hacsak  $\psi'(\mathfrak{R})$ -et alkalmas konstanssal megszorozzuk). Ez azonban éppen az állításunk. Ezzel azt is megmutattuk, hogy  $O$  valóban egyértelműen meg van határozva egy állandó tényező erejéig.

<sup>15</sup> Ha  $H$  az energiaoperátor, úgy a  $\varphi_t$  hullámfüggvény (itt  $t$  az idő) Schrödinger szerint a

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = H \varphi_t$$

differenciálegyenletnek megfelelően változik. Innen  $\varphi_t(\mathfrak{R})$ -re következik, aszerint, hogy

$$\varphi(\mathfrak{R}) = O_{\mathfrak{R}} \varphi \quad \text{vagy} \quad = \overline{O_{\mathfrak{R}} \varphi},$$

a

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t(\mathfrak{R}) = H' \varphi_t(\mathfrak{R}), \quad H' = O_{\mathfrak{R}} H O_{\mathfrak{R}}^{-1} \text{ ill. } = -O_{\mathfrak{R}} H O_{\mathfrak{R}}^{-1}$$

differenciálegyenlet. Eszerint az energiának az  $\mathfrak{R}$ -rel elforgatott térben a  $H'$  operátor felel meg. Az első esetben  $H'$  sajátértékei nyilvánvalóan megegyeznek  $H$  sajátértékeivel; a második esetben ellentétes előjelűek. Ez kizárja a második esetet.



A következők szempontjából alapvető fontosságú, hogy az  $O_{\mathfrak{R}}$  lineáris ortogonális operátor pusztán egy (egységnyi abszolútértékű) állandó tényező erejéig van meghatározva; ez (amint a következő szakaszból kitűnik) odavezet, hogy  $O_{\mathfrak{R}}$  lényegében egy ún. többszörös ábrázolása a forgáscsoportnak (vö. a <sup>20</sup> lábjegyzettel), ami döntő lesz a spektroszkópiai alkalmazások szempontjából.

Most rátérünk arra, hogy egyidejűleg szemügyre véve az  $\mathfrak{R}$ ,  $\mathfrak{S}$  elforgatásokat, megkapjuk  $O_{\mathfrak{R}}$  ábrázolás-mivoltát.

4. Ha  $\varphi(x'_1, \dots, z'_n; s_1, \dots, s_n)$ -et  $\varphi(x_1, \dots, z_n; s_1, \dots, s_n)$ -nel helyettesítjük (ahol  $x'_1, \dots, z'_n$  és  $x_1, \dots, z_n$  kapcsolatát

$$x'_v = \alpha_{11}x_v + \alpha_{12}y_v + \alpha_{13}z_v,$$

$$y'_v = \alpha_{21}x_v + \alpha_{22}y_v + \alpha_{23}z_v,$$

$$z'_v = \alpha_{31}x_v + \alpha_{32}y_v + \alpha_{33}z_v$$

adja meg), nyilvánvalóan lineáris ortogonális operációt végzünk; ennek operátorát jelölje  $P_{\mathfrak{R}}^{-1}$ . Vegyük most szemügyre a (szintén lineáris és ortogonális)  $P_{\mathfrak{R}}^{-1}O_{\mathfrak{R}} = Q_{\mathfrak{R}}$  operátort.

Ha  $\mathfrak{R}$  és  $\mathfrak{S}$  két elforgatás és  $\mathfrak{R}\mathfrak{S}$  a szorzatuk, úgy  $\varphi(\mathfrak{R}\mathfrak{S})$  egy állandó tényező erejéig van definiálva s így

$$O_{\mathfrak{R}}O_{\mathfrak{S}} = \text{const. } O_{\mathfrak{R}\mathfrak{S}}.$$

Nyilvánvalóan fennáll továbbá

$$P_{\mathfrak{R}}^{-1}P_{\mathfrak{S}}^{-1} = P_{\mathfrak{R}\mathfrak{S}}^{-1}.$$

Ha  $T$  olyan mennyiség operátora, amelyben a spin egyáltalán nem lép fel, úgy világos, hogy ezen mennyiség szempontjából  $\varphi(\mathfrak{R})$  ugyanaz az állapot, mint az, amely  $\varphi$ -ből az  $x_1, \dots, z_n \rightarrow x'_1, \dots, z'_n$  koordinátatranszformáció útján áll elő. Azaz: ami ezt a mennyiséget illeti,  $\psi$  nem különbözik  $P_{\mathfrak{R}}^{-1}O_{\mathfrak{R}}\psi = Q_{\mathfrak{R}}\psi$ -től. Ha azonban minden  $\psi$  átmegy a megfelelő  $Q_{\mathfrak{R}}\psi$ -be, úgy a  $T$  operátor  $Q_{\mathfrak{R}}TQ_{\mathfrak{R}}^{-1}$ -be megy át, így tehát fennáll:

$$T = Q_{\mathfrak{R}}TQ_{\mathfrak{R}}^{-1}, \quad TQ_{\mathfrak{R}} = Q_{\mathfrak{R}}T.$$

Mint hogy a  $T$  mennyiségben a spin nem lép fel, meg lehet neki egy  $T'$  operátort feleltetni, mely már a  $\varphi_{s_1, \dots, s_n}$  „spintelen” hullámfüggvényre alkalmazható és a  $T\varphi = \psi$  operátort

$$T'\varphi_{s_1, \dots, s_n} = \psi_{s_1, \dots, s_n}$$

segítségével definiálhatjuk. Itt  $T'$  tetszőleges. Mint hogy  $Q_{\mathfrak{R}}$  mindezen  $T$  operátorokkal felcserélhető, az szükségképpen a következő alakú:

$$Q_{\mathfrak{R}}\varphi = \psi,$$

$$\psi_{s_1, \dots, s_n} = \sum_{t_1, \dots, t_n = \pm 1} a_{s_1, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n}^{(\mathfrak{R})} \varphi_{t_1, \dots, t_n}$$



(itt  $a_{s_1, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n}^{(\mathfrak{R})}$  állandókat jelöl, melyek csupán  $\mathfrak{R}$ -től, valamint az  $s_1, \dots, s_n, t_1, \dots, t_n$  változóktól függenek).<sup>16</sup>

Mivel  $Q_{\mathfrak{R}}$  ortogonális, az

$$\{a_{s_1, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n}^{(\mathfrak{R})}\}$$

mátrix szintén az (itt  $s_1, \dots, s_n$  a sorokat,  $t_1, \dots, t_n$  az oszlopokat különbözteti meg).<sup>17</sup> Továbbá  $Q_{\mathfrak{R}}$  nyilvánvalóan felcserélhető minden  $P_{\mathfrak{E}}^{-1}$ -gyel, tehát ezek is felcserélhetők  $O_{\mathfrak{R}}$ -rel; eszerint fennáll

$$Q_{\mathfrak{R}} Q_{\mathfrak{E}} = \text{const } Q_{\mathfrak{R}, \mathfrak{E}},$$

$$\{a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\} \{a_{s,r}^{(\mathfrak{E})}\} = \text{const } \{a_{s,r}^{(\mathfrak{R}\mathfrak{E})}\}.$$

Végezetül  $Q_{\mathfrak{R}}$  csupán egy egységnyi abszolút értékű tényező erejéig van meghatározva (mivel ez már  $O_{\mathfrak{R}}$ -re is igaz!), ennél fogva  $\{a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  determinánsát egyenlővé tehetjük 1-gyel (hiszen a determináns abszolútértéke az ortogonalitás folytán = 1). Így fenti egyenletünkben a const-nak egy  $2^n$ -edik egységgyöknek kell lennie.

5. Az előző szakasz utolsó egyenlete módot ad az  $\{a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  mátrixok, s ezzel együtt a  $Q_{\mathfrak{R}}$  és  $O_{\mathfrak{R}} = P_{\mathfrak{R}} Q_{\mathfrak{R}}$  operátorok meghatározására:  $\{a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  nem más, mint a háromdimenziós forgáscsoport egy (legfeljebb  $2^n$ -szeresen) többértékű,  $2^n$  dimenziós ábrázolása.<sup>18</sup>

Az  $S_{\xi}^{(v)}$  spionoperátorok immár könnyűszerrel meghatározhatók: ha az  $\mathfrak{R}$  elforgatás a  $+Z$ -irányt a  $\xi$ -irányba viszi át, úgy<sup>19</sup>

$$S_{\xi}^{(v)} = O_{\mathfrak{R}} S_{+Z}^{(v)} O_{\mathfrak{R}}^{-1}.$$

Innen azután következik, hogy

$$S_{\xi}^{(v)} f = g$$

$$g_{s_1, \dots, s_n} = \sum_{t_1, \dots, t_n = \pm 1} \beta_{s_1, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n}^{(v)} f_{t_1, \dots, t_n};$$

<sup>16</sup> Mindenesetre

$$\psi_{s_1, \dots, s_n} = \sum_{t_1, \dots, t_n = \pm 1} A_{s_1, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n}^{(\mathfrak{R})} \varphi_{t_1, \dots, t_n},$$

ahol  $A_{s_1, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n}^{(\mathfrak{R})}$  csupán  $\mathfrak{R}$ -től és az  $s_1, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n$  spinkoordinátáktól függő, „spinmentes” hullámfüggvényekre alkalmazható operátorok. Minthogy ezeknek felcserélhetőnek kell lenniök valamennyi  $T'$ -vel, mind az  $\alpha \cdot 1$  alakúak, amiből következik az állítás.

<sup>17</sup> Komplex értelemben:

$$\sum_s a_{s,t}^{(\mathfrak{R})} \overline{a_{s,r}^{(\mathfrak{R})}} = \begin{cases} 1, & \text{ha valamennyi } t_v = r_v, \\ 0, & \text{egyébként,} \end{cases}$$

$$\sum_s a_{t,s}^{(\mathfrak{R})} \overline{a_{r,s}^{(\mathfrak{R})}} = \begin{cases} 1, & \text{ha valamennyi } t_v = r_v, \\ 0, & \text{egyébként.} \end{cases}$$

<sup>18</sup> Felhívjuk a figyelmet arra, hogy itt — ellentétben Wigner idézett munkájával — többértékű ábrázolást kaptunk. Ez lehetővé fogja tenni, hogy az atomszinképek páros multiplicitásait is megragadjuk; a forgáscsoport egyértékű ábrázolásainak dimenziója mindig páratlan és azok csak páratlan multiplicitást szolgáltatnak (vö. i. m.).

<sup>19</sup> Minthogy  $\varphi$  az  $O_{\mathfrak{R}} \varphi$  függvénybe megy át, minden egyes  $T$  operátort helyettesítenünk kell  $O_{\mathfrak{R}} T O_{\mathfrak{R}}^{-1}$ -gyel.



a  $\xi = +Z$  esetre ezt már tudjuk, ekkor

$$\beta_{s, \dots, s_n; t_1, \dots, t_n}^{v(+Z)} = \begin{cases} 1, & \text{ha minden } s_\mu = t_\mu \text{ és } s_v = 1; \\ -1, & \text{ha minden } s_\mu = t_\mu \text{ és } s_v = -1; \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

vagy röviden

$$\beta_{s,t}^{v(+Z)} = s_v \cdot \delta_{s,t};$$

más  $\xi$ -kre ez egyenletünkéből következik, ahol

$$\{\beta_{s,t}^{v(\xi)}\} = \{a_{s,u}^{(\Re)}\} \{\beta_{u,v}^{v(+Z)}\} \{a_{t,v}^{(\Re)}\}^{-1}.$$

## II. Egy elektron esete

1. Legyen először  $n=1$ , mivel ezt az esetet a legkönnyebb elintézni. Ebben az esetben az  $\{a_{s,t}^{(\Re)}\}$  mátrix kétdimenziós, és a forgáscsoport összes kétdimenziós (véges sok értékű) ábrázolását minden további nélkül megadhatjuk.<sup>20</sup> Igaz ugyanis a következő állítás:

Az  $\{a_{s,t}^{(\Re)}\}$  mátrixok vagy mind egyenlők az  $\begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{Bmatrix}$  egységmátrixszal, vagy pedig oly módon állnak elő, hogy az

$$\begin{Bmatrix} e^{-1/2 i \alpha} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i \alpha} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \cos 1/2 \beta & \sin 1/2 \beta \\ -\sin 1/2 \beta & \cos 1/2 \beta \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} e^{-1/2 i \gamma} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i \gamma} \end{Bmatrix}$$

mátrixot egy konstans mátrix segítségével transzformációnak vetjük alá; itt  $\alpha, \beta, \gamma$  az  $\Re$  elforgatás Euler-szögei.<sup>21</sup>

Az első eset nem jöhet szóba:  $O_{\Re}=1$  folytán ekkor az  $S_{\xi}^{(1)}$  spinoperátorok mind egyenlők volnának  $S_{+Z}^{(1)}$ -vel, így tehát az összes spin egyenlő volna, ami értelmetlenség. A második esetben figyelembe veendő, hogy a  $Z$ -tengely körül elvégzett  $\Re$  elforgatások ( $\beta=0$ ) a  $+Z$ -irányt önmagába viszik át,  $O_{\Re}$  tehát felcserélhető

<sup>20</sup> Vö. pl. H. Weyl, Math. ZS. (2) **24**, 342—353, 1925, különösen a 6. tétel, 353. old. Természetesen jelenlegi céljainkra Weyl mélyenszántó eredményeinél sokkal kevesebb is elég. A mi számunkra fontos fogalmak összeállítása megtalálható egyébként Wigner idézett dolgozatában, 628—631. old. A jobb áttekintés érdekében itt még egyszer megemlítjük: A háromdimenziós forgáscsoport irreducibilis ábrázolásainak foka a  $q=1, 2, \dots$  értékeket veszi fel;  $q$  mindegyik értékéhez pontosan egy irreducibilis ábrázolás tartozik. Ezek az ábrázolások egy- vagy kétértékűek aszerint, hogy  $q$  páratlan, ill. páros. Ha  $\alpha, \beta, \gamma$  az  $\Re$  elforgatás Euler-szögei (vö. alább a <sup>21</sup> lábjegyzettel), úgy a  $v$ -edik sorban és a  $\mu$ -edik oszlopban álló mátrixelem

$$e^{i v \frac{\alpha}{2}} e^{i \mu \frac{\gamma}{2}} f_{v\mu}(\beta)$$

ahol  $f_{v\mu}(\beta)$  homogén polinom  $\cos 1/2 \beta$ -ban és  $\sin 1/2 \beta$ -ban, melynek foka  $q-1$ . (Itt némileg más jelölést alkalmaztunk, mint az idézett helyen.)

<sup>21</sup> Az Euler-szögek jelentése Wigner dolgozatának 1. ábrájából látható, ZS. f. Phys. **43**, 639, 1927, Nr. 9/10 ( $\Re$  az — ívet az — — — ívbe viszi át).



$S_{+Z}^{(1)}$ -vel, azaz  $\{a_{s_1, t_1}^{(\mathfrak{R})}\}$  az  $\begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix}$  mátrixszal. Így tehát átlós mátrixnak kell lennie.

A fent említett konstans transzformációs mátrixnak így az  $\begin{Bmatrix} e^{-1/2 i (\alpha + \gamma)} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i (\alpha + \gamma)} \end{Bmatrix}$  mátrixot átlós mátrixba kell transzformálnia.

Az tehát az

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \eta \end{Bmatrix} \quad \text{vagy a} \quad \begin{Bmatrix} 0 & -\varepsilon \\ \eta & 0 \end{Bmatrix}$$

alakú, s ortogonálisnak kell lennie (mivel  $\{a_{s_1, t_1}^{(\mathfrak{R})}\}$  is az); így tehát

$$|\varepsilon| = |\eta| = 1.$$

A  $\varphi$  „hullámfüggvény” helyettesítése  $\psi$ -vel, ahol

$$\varphi_1 = \varepsilon \psi_1, \quad \varphi_{-1} = \eta \psi_{-1}, \quad \text{ill.} \quad \varphi_1 = -\varepsilon \psi_{-1}, \quad \varphi_{-1} = \eta \psi_1$$

lineáris ortogonális operáció; operátorát jelölje  $A$ . Ha valamennyi  $\varphi$ -t  $A\varphi$ -vel helyettesítjük, úgy minden  $T$  operátor átmegy  $ATA^{-1}$ -be. A spinmentes operátorok (vö. I. rész 4. pont) nem változnak eközben; nem változik  $S_{+Z}^{(1)}$  sem. Azaz: „koordinátarendszerünk” változatlan marad. Megtehetjük ennél fogva, hogy ezeket az operátorokat vesszük alapul, minek következtében  $O_{\mathfrak{R}}$  átmegy  $AO_{\mathfrak{R}}A^{-1}$ -be. Az új  $O_{\mathfrak{R}}$  mátrixa tehát

$$\{a_{s_1, t_1}^{(\mathfrak{R})}\} = \begin{Bmatrix} e^{-1/2 i \alpha} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i \alpha} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \cos 1/2 \beta & \sin 1/2 \beta \\ -\sin 1/2 \beta & \cos 1/2 \beta \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} e^{-1/2 i \gamma} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i \gamma} \end{Bmatrix}.$$

2. Immár nem okoz nehézséget a  $\{\beta_{s_1, t_1}^{(1, \xi)}\}$  mátrixok kiszámítása: ha  $\xi$  iránykoszinuszait  $u, v, w$  jelöli  $u^2 + v^2 + w^2 = 1$ , kapjuk ( $\mathfrak{R}$  Euler-szögei a  $\cos \beta = w$ ,  $e^{i\alpha} \sin \beta = u + iv$ ,  $\gamma = 0$  összefüggésekből határozhatók meg):

$$\{\beta_{s_1, t_1}^{(1, \xi)}\} = \begin{Bmatrix} \cos \beta & e^{-i\alpha} \sin \beta \\ e^{i\alpha} \sin \beta & -\cos \beta \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} w & u - iv \\ u + iv & -w \end{Bmatrix}.$$

Speciálisan a  $+X$ -,  $+Y$ -, ill.  $+Z$ -irányok esetében a

$$\begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{Bmatrix}, \quad \text{ill.} \quad \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix}$$

mátrixok adódnak, Paulival összhangban. Így tehát

$$S_{\xi}^{(1)} = uS_{+X}^{(1)} + vS_{+Y}^{(1)} + wS_{+Z}^{(1)}.$$

Az elektron spinje bizonyosan a  $\xi$  irányba mutat, ha a  $\varphi$  „hullámfüggvény”  $S_{\xi}^{(1)}$ -nek az 1 sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye:

$$S_{\xi}^{(1)} \varphi = \varphi,$$

azaz

$$\begin{cases} w\varphi_1 + (u - iv)\varphi_{-1} = \varphi_1, \\ (u + iv)\varphi_1 - w\varphi_{-1} = \varphi_{-1}, \end{cases}$$



vagy másképpen:

$$\varphi_1 : \varphi_{-1} = (u - iv) : (1 - w) = (1 + w) : (u + iv)$$

(a két utóbbi viszony  $u^2 + v^2 + w^2 = 1$  folytán konstans, tehát ha pl.  $\varphi$  egy kicsiny tartományon kívül eltűnik, azon belül pedig  $\varphi_1 : \varphi_{-1}$  állandó.<sup>22</sup> Ekkor tehát a spinnek jól meghatározott iránya van.<sup>23</sup>

### III. Az általános eset

1. Legyen most  $n$  tetszőleges;  $\{a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  helyett ( $s$  és  $t$  itt  $s_1, \dots, s_n, t_1, \dots, t_n$  helyett áll) a pontosság kedvéért az  $\{a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  jelölést fogjuk használni. Az  $\{a_{s_1,t_1}^{(\mathfrak{R})}\}$  mátrixot már meghatároztuk; meg szeretnénk mutatni, hogy

$${}^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})} = {}^1 a_{s_1,t_1}^{(\mathfrak{R})} \dots {}^1 a_{s_n,t_n}^{(\mathfrak{R})}.$$

Ebből a célból feltesszük, hogy az állítást  $n-1$ -re már bebizonyítottuk; hogy az állítás érvényességét  $n-1$ -ről ki tudjuk terjesztetni  $n$ -re, úgy az általános érvényű.

Vegyük szemügyre az  $n$  elektron azon állapotát, amelyben valamennyiüknek  $\pm Z$ -irányú a spinje; az egyes spinek mutassanak rendre a  $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$  ( $= \pm 1$ ) által jellemzett irányba. Ekkor tehát  $\varphi_{s_1 \dots s_n} = 0$ , hacsak  $s_1 = \sigma_1, \dots, s_n = \sigma_n$  nem teljesül. Mi annak a valószínűsége, hogy (egy  $\xi$ -irányú mágneses tér bekapcsolásakor) az első  $n-1$  elektron rendre a  $\tau_1, \dots, \tau_{n-1}$  által jellemzett irányba áll be ( $\tau_1, \dots, \tau_{n-1}$  a  $\pm 1$  értékeket veszi fel s a  $\xi$ -irányhoz képest jellemzi a spinbeállást)?

Ha  $\mathfrak{R}$  az az elforgatás, amely  $+Z$ -t  $\xi$ -be viszi át, úgy ez a valószínűség  $n-1$  elektron esetére megfogalmazva<sup>24</sup>

$$\int |{}^{n-1} a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, \sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}}^{(\mathfrak{R})} \psi_{\sigma_1, \dots, \sigma_n}|^2 = |{}^{n-1} a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, \sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}}^{(\mathfrak{R})}|^2 \\ = \cos^{2i} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j} \frac{1}{2} \beta$$

<sup>22</sup> Ez lényegében annak a körülírása, hogy az elektron helye pontosan ismert.

<sup>23</sup> Talán nem teljesen érdektelen megjegyezni, hogy a spin esetében a „valószínűségi amplitúdó” komplex részének is közvetlen szemléletes jelentése van. Legyen  $\frac{\varphi_1}{\varphi_{-1}} = \text{const.}$  és határozzuk meg annak  $W$  valószínűségét, hogy a spin a  $+Z$ -irányban 1-gyel egyenlő. Könnyen kiszámítható, hogy  $W = \frac{|\varphi_1|^2}{|\varphi_1|^2 + |\varphi_{-1}|^2}$  és  $W$  a  $+Z$  tengely és a spinirány közbezárt szögének  $w = \frac{|\varphi_1|^2 - |\varphi_{-1}|^2}{|\varphi_1|^2 + |\varphi_{-1}|^2}$  koszinuszával a következő kapcsolatban áll:

$$W = 2w + 1.$$

Mindkét kifejezésben csak  $\left| \frac{\varphi_1}{\varphi_{-1}} \right|$  lép fel. Az arcus  $\frac{\varphi_1}{\varphi_{-1}}$  ezzel szemben, mint arról könnyen meggyőződhetünk, a  $+X$ -irány és a spiniránynak az  $XY$ -síkra vetett vetülete által közbezárt szög.

<sup>24</sup> Itt és a következőkben mindenütt valamennyi térkoordinátára integrálnunk kell; ezt röviden az  $\int$  jellel jelezzük.



( $i$  esetben  $\tau_v = \sigma_v$ ,  $j$  esetben pedig  $\tau_v \neq \sigma_v$ ,  $v = 1, \dots, n-1$ ;  $\alpha, \beta, \gamma$  az  $\mathfrak{R}$  elforgatást jellemző Euler-szögek);  $n$  elektron esetében pedig

$$\int |^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, 1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})} \psi_{\sigma_1, \dots, \sigma_n}|^2 + \int |^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, -1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})} \psi_{\sigma_1, \dots, \sigma_n}|^2 \\ = |^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, 1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})}|^2 + |^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, -1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})}|^2.$$

Innen következik:

$$|^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, 1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})}|^2 + |^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, -1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})}|^2 \\ = \cos^{2i} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j} \frac{1}{2} \beta. \quad (\text{I})$$

A forgáscsoport irreducibilis ábrázolásainak valamennyi mátrixeleme  $\cos \frac{1}{2} \beta$  és  $\sin \frac{1}{2} \beta$  homogén polinomja; ugyanez igaz tetszőleges ábrázolás minden mátrix-elemére (vö. a <sup>20</sup> lábjegyzettel), így tehát az  $^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, \pm 1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})}$  mátrixelemekre is. Ennek folytán  $^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, \pm 1, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})}$  osztható  $\cos^i \frac{1}{2} \beta$ -val és  $\sin^j \frac{1}{2} \beta$ -val. Az  $n$  szám szerepét megfontolásainkban az  $1, \dots, n$  számok bármelyike átveheti; ha ezt oly módon választjuk, hogy  $i$ , ill.  $j$  a lehető legnagyobb értéket vegye fel, a következőket állapíthatjuk meg:

$^n a_{\tau_1, \dots, \tau_n, \sigma_1, \dots, \sigma_n}^{(\mathfrak{R})}$  homogén polinom  $\cos \frac{1}{2} \beta$ -ban és  $\sin \frac{1}{2} \beta$ -ban, és  $\cos^i \frac{1}{2} \beta$ -val és  $\sin^j \frac{1}{2} \beta$ -val osztható, ahol  $i$ , ill.  $j$  azon  $v$  indexek száma, amelyekre  $\tau_v = \sigma_v$ , ill.  $\tau_v \neq \sigma_v$  áll fenn ( $v = 1, 2, \dots, n$ ); kivételt képez az az eset, amikor  $\tau_v = \sigma_v$  vagy  $\tau_v = -\sigma_v$  minden  $v$ -re fennáll — ekkor  $i$ , ill.  $j$  kisebb 1-gyel.

2. Ha  $\beta = 0$ , úgy  $\mathfrak{R}$  a  $+Z$ -tengely körül végrehajtott elforgatást jelöl, mely az  $S_{+Z}^{(v)}$  spinek mindegyikét változatlanul hagyja;  $\{\beta_{s,t}^{v(+Z)}\}$  tehát felcserélhető  $\{^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$ -vel és így  $\{^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  átlós mátrix (a  $\{\beta_{s,t}^{v(+Z)}\}$  mátrixok ismertek; lásd I. rész 5. pont). Az  $\{^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  mátrix a kétdimenziós forgáscsoport ábrázolását képezi (a forgási szög  $\alpha + \gamma$ ); könnyű megmutatni, hogy átlós elemei  $e^{i\mu \frac{1}{2}(\alpha + \gamma)}$  alakúak. Eszerint  $\beta = 0$  esetén fennáll:

$$^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})} = e^{i\mu \frac{1}{2}(\alpha + \gamma)} \delta_{s,t}.$$

Másrésről az  $\{^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  mátrix (ugyancsak lineáris) transzformáció útján áll elő a forgáscsoport egymás mellé sorakoztatott irreducibilis ábrázolásaiából (lásd a <sup>20</sup> lábjegyzetet). Az előforduló irreducibilis ábrázolások közül a legmagasabb fokúnak legyen a foka  $m$ .

Legyen tehát

$$\{^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\} = \{T_{s,u}\} \{J_{u,v}^{(\mathfrak{R})}\} \{T_{t,v}\}^{-1}$$

( $\{T_{s,t}\}$  konstans mátrix,  $\{J_{u,v}^{(\mathfrak{R})}\}$  egymás mellett sorakozó irreducibilis mátrixból áll), azaz

$$^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})} = \sum_{\substack{u_1, \dots, u_n \\ v_1, \dots, v_n}} J_{u,v}^{(\mathfrak{R})} T_{s,u} \bar{T}_{t,v}.$$

Az átlós elemeket speciálisan

$$^n a_{s,s}^{(\mathfrak{R})} = \sum_{u,v} J_{u,v}^{(\mathfrak{R})} T_{s,u} \bar{T}_{s,v}$$

adja meg.

A  $J_{u,v}^{(\mathfrak{R})}$ -ben előforduló legmagasabb fokú irreducibilis ábrázolásnak legyen a foka  $m$ . Az utolsó átlós eleme  $e^{i(m-1)\frac{1}{2}(\alpha + \gamma)} f_{m-2, m-1}(\beta) = e^{i(m-1)\frac{1}{2}(\alpha + \gamma)} \cos^{m-1} \frac{1}{2} \beta$  (amint az E. Wigner idézett művének rekurziós képleteiből kitűnik).



A legmagasabb fokú irreducibilis ábrázolásban, melyre  $q = m$ , fellép  $e^{i(m-1)1/2(\alpha+\gamma)}$   $\cos^{m-1} 1/2 \beta$  mondjuk  $J_{\bar{u}, \bar{u}}^{(R)}$  szerepében; legyen  $T_{\bar{s}, \bar{u}} \neq 0$  és vegyük szemügyre az  ${}^n a_{\bar{s}, \bar{s}}^{(R)}$  elemet. Ekkor  $\beta = 0$  esetén  $J_{\bar{u}, \bar{u}}^{(R)}$ -nak  $|T_{\bar{s}, \bar{u}}|^2$  és  $e^{ip1/2(\alpha+\gamma)}$ -nak  $\Sigma' |T_{\bar{s}, \bar{u}}|^2$  az együtt-hatója; a  $\Sigma'$  mindazon  $u$ -kra terjed ki, amelyekre  $J_{u, u}^{(R)} = e^{ip1/2(\alpha+\gamma)} \cos^{p-1} 1/2 \beta$ . Ennélfogva  $e^{i(m-1)1/2(\alpha+\gamma)}$  együtt-hatója  $\neq 0$ , így tehát  $\mu_{\bar{s}} = m-1$ , és az összes többi  $e^{ip1/2(\alpha+\gamma)}$ -nak 0 az együtt-hatója. Ennélfogva  $T_{\bar{s}, u} = 0$ , hacsak  $J_{u, u}^{(R)}$  nem egy maxi-mális ( $=m$ ) fokú irreducibilis ábrázolás  $e^{i(m-1)1/2(\alpha+\gamma)}$ -t tartalmazó (azaz utolsó) átlós eleme.

Ha  $\beta$  különbözik 0-tól, akkor

$${}^n a_{\bar{s}, \bar{s}}^{(R)} = \sum J_{u, v}^{(R)} T_{\bar{s}, u} \bar{T}_{\bar{s}, v}.$$

Itt  $T_{\bar{s}, u} = 0$ , ill.  $T_{\bar{s}, v} = 0$ , ha  $u$  és  $v$  nem a fent említett fajtájúak;  $J_{u, v}^{(R)} = 0$ , ha  $u, v$  a fent mondott fajtájú, azonban  $u \neq v$ .<sup>25</sup> Ennélfogva

$${}^n a_{\bar{s}, \bar{s}}^{(R)} = \sum' J_{u, u}^{(R)} |T_{\bar{s}, u}|^2 = \text{const.} e^{i(m-1)\frac{\alpha+\gamma}{2}} \cos^{m-1} 1/2 \beta$$

( $\Sigma'$  az említett  $u$  értékekre terjesztendő ki). Minthogy  $\alpha = \beta = \gamma = 0$  esetén  $\{{}^n a_{s, t}^{(R)}\}$  az egységmátrix, ez a const. egyenlő eggyel.

3. Az 1. pont (I) képletéből és a 2. pont utolsó egyenletéből következik:

$$|{}^n a_{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_n; \bar{s}_1, \dots, -\bar{s}_n}^{(R)}|^2 = \cos^{2(m-2)1/2} \beta,$$

$$|{}^n a_{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_n; \bar{s}_1, \dots, -\bar{s}_n}^{(R)}|^2 + |{}^n a_{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_n; \bar{s}_1, \dots, \bar{s}_n}^{(R)}|^2 = \cos^{2(n-1)1/2} \beta,$$

$$|{}^n a_{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_{n-1}, \bar{s}_n; \bar{s}_1, \dots, -\bar{s}_{n-1}, -\bar{s}_n}^{(R)}|^2 + |{}^n a_{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_{n-1}, \bar{s}_n; \bar{s}_1, \dots, -\bar{s}_{n-1}, \bar{s}_n}^{(R)}|^2 = \cos^{2(n-2)1/2} \beta \sin^2 1/2 \beta,$$

tehát

$$\begin{aligned} \cos^{2(m-1)1/2} \beta - |{}^n a_{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_{n-1}, \bar{s}_n; \bar{s}_1, \dots, -\bar{s}_{n-1}, -\bar{s}_n}^{(R)}|^2 &= \\ &= \cos^{2(n-1)1/2} \beta - \cos^{2(n-2)1/2} \beta \sin^2 1/2 \beta, \end{aligned}$$

azaz, ha a  $\cos^2 1/2 \beta = x$  jelölést alkalmazzuk:

$$|{}^n a_{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_{n-1}, \bar{s}_n; \bar{s}_1, \dots, -\bar{s}_{n-1}, -\bar{s}_n}^{(R)}|^2 = x^{m-1} - 2x^{n-1} + x^{n-2}.$$

A jobb oldalnak minden  $0 \leq x \leq 1$  értékre nem negatívnak kell lennie, ahonnan — mint könnyen belátható — következik, hogy  $m \leq n+1$ .<sup>26</sup>

Így tehát minden,  $\{J_{u, v}^{(R)}\}$ -ben előforduló irreducibilis ábrázolás foka  $\leq n+1$ . Az  $\{{}^n a_{s, t}^{(R)}\}$  mátrix elemei (ami  $\beta$ -tól való függésüket illeti)  $\cos 1/2 \beta$  és  $\sin 1/2 \beta$  polinomjai, melyeknek foka  $\leq n$ . Így tehát (vö. az 1. pont végkövetkeztetésével)

$${}^n a_{s, t}^{(R)} = C_{s, t}(\alpha, \gamma) \cos^{i1/2} \beta \sin^{j1/2} \beta \quad (\text{II})$$

<sup>25</sup> Ekkor az  $u$  sor a  $\{J_{u, v}^{(R)}\}$  mátrixban más irreducibilis ábrázoláson halad át, mint a  $v$  oszlop, úgyhogy  $\{J_{u, v}^{(R)}\}$  az irreducibilis ábrázoláson kívül fekszik és eltűnik.

<sup>26</sup>  $x^{m-1} - 2x^{n-1} + x^{n-2}$  egyenlő 0-val, ha  $x=1$ , ennek folytán deriváltja ott  $\leq 0$ , azaz

$$m-1-2(n-1)+n-2 \leq 0, \quad m \leq n+1.$$



( $i$ , ill.  $j$  azon  $v = 1, \dots, n$  értékek száma, amelyekre  $s_v = t_v$ , ill.  $s_v \neq t_v$ ); kivételt képeznek az  $s_1 = t_1, \dots, s_n = t_n$  és  $s_1 = -t_1, \dots, s_n = -t_n$  esetek. Ezekben az esetekben

$${}^n a_{s,s}^{(\Re)} = C_{s,s}(\alpha, \gamma) \cos^{n-1/2} \beta (d_s \cos^{1/2} \beta + e_s \sin^{1/2} \beta),$$

$${}^n a_{s,-s}^{(\Re)} = C_{s,s}(\alpha, \gamma) \sin^{n-1/2} \beta (f_s \cos^{1/2} \beta + g_s \sin^{1/2} \beta).$$

Az 1. pont (I) egyenletének alkalmazásával kapjuk azonban:  $e_s = 0, f_s = 0$ , úgy-hogy (II) egyenletünk mindig érvényes.

4. Ha  $\alpha = \gamma = 0$ ,  $\{ {}^n a_{s,t}^{(\Re)} \}$  átlós elemeinek összege (spurja)

$$\text{const.} \cos^{n-1/2} \beta.$$

Ha  $\beta = 0$ ,  $\{ {}^n a_{s,t}^{(\Re)} \}$  az egységmátrix, melynek spurja  $2^n$ , a konstans tehát  $2^n$ . Ugyanez a spurja ( $\alpha = \gamma = 0$  esetén) az

$$\{ {}^1 a_{s_1, t_1}^{(\Re)} \dots {}^1 a_{s_n, t_n}^{(\Re)} \}$$

mátrixnak, amellyel a bizonyítandó állítás szerint  $\{ {}^n a_{s,t}^{(\Re)} \}$  megegyezik. Mind a két spur lineáarkombinációja a szóban forgó ábrázolásokban foglalt irreducibilis ábrázolások átlósösszegeinek; ennek folytán mind a két ábrázolás ugyanazokat az irreducibilis ábrázolásokat tartalmazza (s ennél fogva egymásba transzformálhatók), hacsak a forgáscsoport irreducibilis ábrázolásainak átlósösszegei egymástól  $\alpha = \gamma = 0$  esetén is lineárisan függetlenek. Ez azonban így is van: az irreducibilis ábrázolásnak, melynek  $q$  a foka,  $\alpha = \gamma = 0$  mellett  $q \cos^{q-1/2} \beta$  a spurja (vö. a <sup>20</sup> lábjegyzettel). Ezzel immár igazoltuk, hogy mátrixunk ortogonális transzformációval a kívánt alakra hozható (csak egyenlőségüket nem bizonyítottuk még).

Ha  $\beta = 0$  (vö. 2. pont),

$${}^n a_{s,t}^{(\Re)} = e^{i\mu_s^{1/2}(\alpha+\gamma)} \delta_{s,t}$$

és az  $\alpha, \beta, \gamma$  forgási szögekkel jellemzett elforgatás szorzata az  $\alpha, 0, 0; 0, \beta, 0; \gamma, 0, 0$  szögekkel jellemzett elforgatásoknak;<sup>27</sup> általában fennáll tehát:

$$\begin{aligned} {}^n a_{s,t}^{(\Re)} &= e^{i\mu_s^{1/2}\alpha} \cdot C_{s,t}^{(\Re)}(0,0) \cos^{i1/2}\beta \sin^{j1/2}\beta e^{i\mu_t^{1/2}\gamma} = \\ &= C_{s,t}^{(\Re)} e^{i(\mu_s^{1/2}\alpha + \mu_t^{1/2}\gamma)} \cos^{i1/2}\beta \sin^{j1/2}\beta, \end{aligned}$$

és itt  $C_{s,t}^{(\Re)}$  konstans. Ha ide behelyettesítjük az  $\alpha = \beta = \gamma = 0$  értékeket, úgy  $\{ {}^n a_{s,t}^{(\Re)} \}$  az egységmátrixszal egyenlő; ennek folytán valamennyi  $C_{s,s}^{(\Re)}$  értéke egy.

Eszerint  $\{ {}^n a_{s,t}^{(\Re)} \}$  spurja

$$\sum_s e^{i\mu_s \frac{\alpha+\gamma}{2}} \cos^{n-1/2} \beta$$

és ennek egyenlőnek kell lennie az  $\{ {}^1 a_{s_1, t_1}^{(\Re)} \dots {}^1 a_{s_n, t_n}^{(\Re)} \}$  mátrix

$$\sum_s e^{i(\sum_v s_v) \frac{\alpha+\gamma}{2}} \cos^{n-1/2} \beta$$

átlósösszegével. Ennél fogva a  $\mu_s$ -ek a sorrendtől eltekintve megegyeznek a  $\sum_v s_v$

<sup>27</sup> Azaz: a Z-tengely körül  $\alpha$ , az X-tengely körül  $\beta$ , a Z-tengely körül  $\gamma$  szöggel végzünk elforgatást; éppen ez az Euler-szögek definíciója.



értékekkel; azaz megadható az  $s = s_1, \dots, s_n$  ( $s_1, \dots, s_n = \pm 1$ ) sorozatok olyan kölcsönösen egyértelmű  $s \rightarrow \bar{s}$  egymáshoz rendelése, hogy  $\mu_s = \sum_v \bar{s}_v$ . Látjuk tehát:

$\{^n a_{s,t}^{(\mathfrak{R})}\}$  az  $\{^1 a_{s_1,t_1}^{(\mathfrak{R})} \dots ^1 a_{s_n,t_n}^{(\mathfrak{R})}\}$  mátrixtól csak az elemek előtt álló állandó tényezőkben, valamint az összes sorra és oszlopra alkalmazott (közös) permutációban különbözhet. Most a még hátralevő lehetőségeket kell megvizsgálnunk.

5. Vegyük szemügyre  $n$  elektron valamely állapotát, melyben minden spin a  $\pm Z$ -tengely irányában van orientálva; ami azonban az orientációkat illeti, két kombináció lehetséges:  $s_1, \dots, s_n$  és  $r_1, \dots, r_n$ . A  $\varphi$  „hullámfüggvényre” tehát a

$$\varphi_{t_1, \dots, t_n} \equiv 0, \quad \text{ha} \quad t_1, \dots, t_n \neq \begin{cases} s_1, \dots, s_n \\ r_1, \dots, r_n \end{cases}$$

feltételt írjuk elő. Tegyük fel továbbá egyelőre, hogy  $s_n = t_n = 1$ ; ekkor az  $n$ -edik elektron spinje bizonyosan a  $+Z$ -tengely irányába mutat. Eltekinthetünk tehát tőle, és az első  $n-1$  elektront is jellemezhetjük egy  $\varphi^*$  „hullámfüggvénnyel”:

$$\varphi_{t_1, \dots, t_{n-1}}^* \equiv 0, \quad \text{ha} \quad t_1, \dots, t_{n-1} \neq \begin{cases} s_1, \dots, s_{n-1} \\ r_1, \dots, r_{n-1} \end{cases}$$

Mi a valószínűsége, hogy az első  $n-1$  elektron (egy  $\xi$ -irányú mágneses tér bekapcsolásakor) a  $\tau_1, \dots, \tau_{n-1}$  értékeknek megfelelően áll be ( $\tau_1, \dots, \tau_{n-1}$  a  $\pm 1$  értékeket veszi fel s a  $\xi$ -irányhoz képest jellemzi a spinbeállítást)?

Ha az  $\mathfrak{R}$  elforgatás  $+Z$ -t  $\xi$ -be viszi át, úgy ez a valószínűség  $n-1$  elektronra megfogalmazva<sup>28</sup>

$$\int^* |^{n-1} a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, s_1, \dots, s_{n-1}}^{(\mathfrak{R})} \varphi_{s_1, \dots, s_{n-1}}^* + ^{n-1} a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, r_1, \dots, r_{n-1}}^{(\mathfrak{R})} \varphi_{r_1, \dots, r_{n-1}}^*|^2,$$

$n$  elektron esetére megfogalmazva pedig

$$\begin{aligned} & \int |^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, 1, s_1, \dots, s_{n-1}, 1} \varphi_{s_1, \dots, s_{n-1}, 1} + ^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, 1, r_1, \dots, r_{n-1}, 1} \varphi_{r_1, \dots, r_{n-1}, 1}|^2 + \\ & + \int |^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, -1, s_1, \dots, s_{n-1}, 1} \varphi_{s_1, \dots, s_{n-1}, 1} + ^n a_{\tau_1, \dots, \tau_{n-1}, -1, r_1, \dots, r_{n-1}, 1} \varphi_{r_1, \dots, r_{n-1}, 1}|^2. \end{aligned}$$

Ennek a két kifejezésnek egymással meg kell egyeznie. Felesleges számítások elkerülése céljából behelyettesítjük az  $\alpha=0$ ,  $\beta=\pi/2$  értékeket és a  $\gamma$ -tól való függést vesszük szemügyre:

$$\begin{aligned} ^{n-1} a_{u_1, \dots, u_{n-1}, v_1, \dots, v_{n-1}}^{(\mathfrak{R})} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2^n}} e^{i \sum v_v^{1/2} \gamma}, \\ ^n a_{u_1, \dots, u_n, v_1, \dots, v_n}^{(\mathfrak{R})} &= c_{u,v} \frac{1}{\sqrt{2^n}} e^{i \mu_v^{1/2} \gamma}. \end{aligned}$$

Nyomban látható: az első kifejezés 1 és  $e^{\pm i(\sum s_v - \sum t_v)^{1/2} \gamma}$ , a második pedig 1 és  $e^{\pm i(\mu_s - \mu_r)^{1/2} \gamma}$  lineáris kombinációja. Eszerint

$$\mu_s - \mu_r = \pm (\sum s_v - \sum r_v). \quad (\text{III})$$

<sup>28</sup> Az összes térkoordinátára való integrálást az  $\int$  szimbólummal, az első  $n-1$  elektron térkoordinátáira való integrálást az  $\int^*$  jellel jelezzük.



Ez az eredmény, melyet az  $s_n=r_n=1$  esetre bizonyítottunk, természetesen ugyanúgy érvényes  $s_n=r_n=-1$  esetére is; csupán  $s_n=r_n$  fennállása szükséges tehát. Továbbá  $n$  szerepét az  $1, \dots, n$  számok bármelyike átveheti, így tehát (III) mindig igaz, hacsak egy olyan  $v=1, \dots, n$  érték van, amelyre fennáll  $s_v=r_v$ . Azaz mindaddig, amíg nem az  $s_1=-r_1, \dots, s_n=-r_n$  esettel állunk szemben.

Ebből és a 4. pont végén tett megállapításból következik azonban, hogy mindenkor  $\mu_s = \sum s_v$  vagy mindenkor  $\mu_s = -\sum s_v$ .<sup>29</sup> Fennáll tehát:

$${}^n a_{s,t}^{(\Re)} = C_{s,t} e^{\pm i \left( \sum s_v \frac{\alpha}{2} + \sum t_v \frac{\gamma}{2} \right)} \cos^{i 1/2} \beta \sin^{j 1/2} \beta$$

(mindig a + vagy mindig a - előjelet kell választanunk), azaz mindenkor

$${}^n a_{s,t}^{(\Re)} = C'_{s,t} {}^1 a_{s_1, t_1}^{(\Re)} \dots {}^1 a_{s_n, t_n}^{(\Re)}$$

vagy mindenkor

$${}^n a_{s,t}^{(\Re)} = C'_{s,t} {}^1 a_{-s_1, -t_1}^{(\Re)} \dots {}^1 a_{-s_n, -t_n}^{(\Re)}.$$

Minthogy  $\{{}^n a_{s,t}^{(\Re)}\}$  transzformáció útján áll elő az  $\{{}^1 a_{s_1, t_1}^{(\Re)} \dots {}^1 a_{s_n, t_n}^{(\Re)}\} = \{A_{s,t}^{(\Re)}\}$  mátrixból, mondjuk a  $\{T_{su}\}$  konstans ortogonális mátrix segítségével, így tehát

$${}^n a_{s,t}^{(\Re)} = \sum_{uv} A_{u,v}^{(\Re)} T_{su} \bar{T}_{tv},$$

azaz

$$C'_{s,t} A_{s,t}^{(\Re)}, \text{ ill. } C'_{s,t} A_{-s,-t}^{(\Re)} = \sum_{u,v} A_{u,v}^{(\Re)} T_{su} \bar{T}_{tv}.$$

Az  $A_{u,v}^{(\Re)}$  mátrixelemek között vannak ugyan egyenlők<sup>30</sup>, azok azonban, amelyek (az előjeltől eltekintve) különböznek egymástól, nyilvánvalóan lineárisan függetlenek; a fenti egyenlet ennél fogva érvényes marad, ha az  $A_{u,v}^{(\Re)}$ -k mindegyikét eggyel helyettesítjük:

$$C'_{s,t} = \sum_{u,v} T_{s,u} \bar{T}_{t,v} = \left( \sum_u T_{s,u} \right) \left( \sum_v \bar{T}_{t,v} \right) = d_s \bar{d}_t.$$

<sup>29</sup> Ezt a következtetést  $n > 2$  esetén különösebb fáradság nélkül sikerül elvégezni;  $n = 2$  esetén azonban első látásra a

$$\mu_{1,1} = \mu_{-1,-1} = 0, \quad \mu_{1,-1} = \pm 2, \quad \mu_{-1,1} = \mp 2$$

lehetőséget is meg kellene fontolni. Ebből azonban  $n = 3$  esetén a korábban használt módszerre

$$\mu_{1,-1,1} - \mu_{-1,1,1} = \mu_{1,-1} - \mu_{-1,1} = \pm 4$$

fennállására következtethetünk; a három indexet ciklikusan felcserélve:

$$\mu_{-1,1,1} - \mu_{1,1,-1} = \pm 4, \quad \mu_{1,1,-1} - \mu_{1,-1,1} = \pm 4$$

(a három  $\pm$  független egymástól). Összeadással ebből a  $0 = \pm 4 \pm 4 \pm 4$  eredményre jutunk, ami nyilvánvalóan lehetetlenség.

<sup>30</sup> Az  ${}^1 a_{s_1, t_1}^{(\Re)}$ -re vonatkozó képletből következik:

$$A_{s,t}^{(\Re)} = \pm e^{i \left( \sum s_v \frac{\alpha}{2} + \sum t_v \frac{\gamma}{2} \right)} \cos^{i 1/2} \beta \sin^{j 1/2} \beta,$$

ahol  $i$  és  $j$  azon  $v$  indexek száma, amelyekre  $s_v = t_v$ , ill.  $s_v \neq t_v$ ; a +, ill. - előjel pedig attól függően választandó, hogy páros vagy páratlan számú  $v$  indexre áll fenn

$$s_v = 1, \quad t_v = -1.$$

(Az  $i$  képzetes egység és az  $i$  index összetévesztésének veszélye aligha forog fenn.)



Végeredményünk tehát:

$${}^n a_{s,t}^{(9)} = d_s \bar{d}_t \cdot {}^1 a_{s_1, t_1}^{(9)} \dots {}^1 a_{s_n, t_n}^{(9)}, \quad (\text{IV})$$

vagy ehelyett mindenkor

$${}^n a_{s,t}^{(9)} = d_s \bar{d}_t \cdot {}^1 a_{-s_1, -t_1}^{(9)} \dots {}^1 a_{-s_n, -t_n}^{(9)}. \quad (\text{IV})$$

Az ortogonalitás miatt ezenkívül a

$$|d_1| = \dots = |d_n| = 1$$

feltételnek is teljesülnie kell.

6. A (IV) egyenleteknél tovább közvetlenül nem juthatunk: az  $n=1$  esetben is (II. rész 1. pont) fennmaradt egy ennek megfelelő bizonytalanság. Itt is azonban, csakúgy mint ott, elég egy transzformáció, melynek mátrixa

$$\{d_s \delta_{s,t}\}, \quad \text{ill.} \quad \{d_s \delta_{s,-t}\},$$

hogy megkapjuk a kívánt alakot.<sup>31</sup> Helyettesítsünk tehát minden  $\varphi$  hullámfüggvényt  $\psi$ -vel, ahol

$$\varphi_s = d_s \psi_s, \quad \text{ill.} \quad \varphi_s = d_s \psi_{-s};$$

ekkor először is  $\{{}^n a_{s,t}^{(9)}\}$  a kívánt alakot nyeri, másodsor valamennyi  $S_{+Z}^{(v)}$  önmagába megy át, harmadszor: ugyanez igaz valamennyi spinmentes operátorra is. Azaz: változatlan „koordinátarendszer” mellett elérhető, hogy  $\{{}^n a_{s,t}^{(9)}\}$  a kívánt alakú legyen.

Ezzel célunkat elértük: az  $\{{}^n a_{s,t}^{(9)}\}$  mátrixot minden  $n$ -re meghatároztuk.

#### IV. Következmények

1. Mindenek előtt meghatározzuk  $S_\xi^{(v)}$ -t tetszőleges  $n$ -re, azaz: a  $\{\beta_{s,t}^{(v)}\}$  mátrixot. Ha követjük az I. rész 1. pont végén adott útmutatást, úgy az  $u, v, w$  iránykoszinuszokkal jellemzett  $\xi$  irány esetére e mátrix értékét minden további nélkül megkaphatjuk; célszerűbb azonban mindjárt az  $S_\xi^{(v)}$  operátor hatását megadó képleteket felírni (a külön kiírt index a  $v$ -edik helyen áll):

$$S_\xi^{(v)} \varphi = \psi,$$

$$\psi_{s_1, \dots, 1, \dots, s_n} = w \varphi_{s_1, \dots, 1, \dots, s_n} + (u - iv) \varphi_{s_1, -1, \dots, s_n},$$

$$\psi_{s_1, \dots, -1, \dots, s_n} = (u + iv) \varphi_{s_1, \dots, 1, \dots, s_n} - w \varphi_{s_1, \dots, -1, \dots, s_n}.$$

Eszerint a  $v$ -edik elektron pontosan úgy viselkedik, mint a II. részben, azaz mintha a többi  $n-1$  elektron nem volna jelen; speciálisan most is

$$S_\xi^{(v)} = u S_{+X}^{(v)} + v S_{+Y}^{(v)} + w S_{+Z}^{(v)}.$$

<sup>31</sup> Ha  $s=s_1, \dots, s_n$ , úgy  $-s=-s_1, \dots, -s_n$ ; továbbá legyen  $\delta_{s,t}=1$ , ha  $s_1=t_1, \dots, s_n=t_n$ , egyébként pedig  $=0$ .



2. Az alkalmazások szempontjából fontos tudni:  $\{^n a_{s,t}^{(q)}\}$  a forgáscsoport mely irreducibilis ábrázolásait foglalja magában? Ezt könnyű megállapítani, mint-hogy  $\{^n a_{s,t}^{(q)}\}$  spurja a benne foglalt irreducibilis ábrázolásokéiból additíve tevődik össze. Legyen  $\beta = \gamma = 0$ ; ekkor  $\{^n a_{s,t}^{(q)}\}$  spurja

$$\sum_s e^{i \Sigma s v \frac{\alpha}{2}} = \sum_{x=0}^n \binom{n}{x} e^{i(2x-n) \frac{\alpha}{2}},$$

ugyanakkor annak az irreducibilis ábrázolásnak, amelynek a foka  $q$ ,

$$\sum_{x=0}^{q-1} e^{i(2x-q+1) \frac{\alpha}{2}}$$

a spurja. Ha tehát  $\{^n a_{s,t}^{(q)}\}$ -ben a  $q$ -adfokú irreducibilis ábrázolás pontosan  $N_q$ -szor fordul elő, úgy

$$\sum_{x=0}^n \binom{n}{x} e^{i(2x-n) \frac{\alpha}{2}} = \sum_q N_q \sum_{x=0}^{q-1} e^{i(2x-q+1) \frac{\alpha}{2}}.$$

Innen nyomban következik, hogy csak olyan irreducibilis ábrázolások lépnek fel, melyeknek foka  $q = 1, \dots, n+1$  (amit a III., 3. szakaszból már tudunk), és hogy  $N_q = 0$ , ha  $n-q$  páros és

$$= \binom{n}{\frac{n-q+1}{2}} - \binom{n}{\frac{n-q-1}{2}}, \quad \text{ha } n-q \text{ páratlan.}$$

Az előforduló irreducibilis ábrázolások foka:  $n+1, n-1, n-3, \dots$  a megfelelő multiplicitások pedig:  $1, n-1, \frac{n(n-3)}{2}, \dots$

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy páros  $n$  esetén csak egyértékű, páratlan  $n$  esetén csak kétértékű ábrázolások lépnek fel.



# KÖNYVISMERTETÉSEK

## *Kovács István: ROTATIONAL STRUCTURE IN THE SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES. 1970.*

Kovács István monográfiája a mikrofizika speciális területét dolgozza fel. Kétatomos molekulák optikai spektrumai nyújtották a mai napig a molekulák pontos fizikai sajátosságainak legmélyebb ismeretét. Ezen a területen a szerzőnek hazai viszonylatban neves elődei voltak Schmid és Gerő, és kiváló egykori munkatársa Budó Ágoston személyében. A szerző utolsó évtizedes munkássága jelentősen előrevitte a „vibronic” sávok rotációs szerkezetének megismerését, illetve elméleti értelmezését. Kétatomos molekulák rotációs paraméterei *jelenleg közvetlenül* a molekula szerkezet földerítésére irányuló adatot nem szolgáltatnak. Mégis nagyjelentőségűek ezek a kutatások, mert a többatomos molekulákra is alkalmazható igen bonyolult elmélet iskoláját teremti meg. Többatomos molekulák sávjainak rovibrációs szerkezete viszont — például a Coriolis csatolási állandókban — további adatokat ad egyéb fizikai sajátosságok (potenciálfüggvények, erőállandók) meghatározására. A könyv itt említett iskolászerű rendeltetését ékesen illusztrálja az a rengeteg táblázatos összeállítás, mely további számítások kiindulópontját szolgáltatja.

A 300 oldal terjedelmű könyv négy fejezetből áll. Az első a kétatomos molekulák kvantummechanikai elméletét foglalja össze, különös tekintettel a vibronic sávok rotációs szerkezetére. A második fejezet, széles körű nemzetközi irodalom feldolgozásával, a különböző multiplicitású termek kiszámításával és formuláival foglalkozik. A harmadik fejezet tárgya a rotációs vonalak intenzitáseloszlása. Ezen a területen találhatók a szerző legjelentősebb eredményei. Végül a negyedik fejezet a perturbációs jelenségekkel foglalkozik, valamint a perturbációs termek meghatározásának módszereivel.

A tárgyalás 216 monográfiára, illetve közleményre támaszkodik. Jellemzi a könyv tárgyának speciális jellegét, valamint a szerző e téren kifejtett munkásságának jelentőségét, hogy tőle származik az irodalmi anyag egyhatod része. Nyilvánvaló, hogy az e területen működő elméleti spektroszkópusok egyedülálló segítséget kapnak ebben a könyvben, melynek megjelenését a Magyar Akadémiai Kiadó és a Hilger cég közös kiadásában örömmel üdvözljük.

*Varsányi György*

## *Auguste Dick: EMMY NOETHER. Birkhäuser Kiadó. Basel. 1970.*

A svájci kiadó Elemente der Mathematik folyóiratának mellékleteként rendszeresen jelennek meg matematikai életrajzok. Példaképpen felemlítem a már megjelentek közül Jakob Steiner, Leonhard Euler, Pierre Fermat, a két Bolyai életrajzát. Az ismertetett mű címadója Emmy Noether 1882-ben született a bajorországi Erlangenben, 1935-ben az USA-ban halt meg váratlanul egy tumor operáció után. Erlangen az egyetemen dolgozó matematikusai révén (Christian von Staudt, Felix Klein, stb.) a matematikai irodalomban leggyakrabban idézett város. Emmy Noether apja Max Noether (1844—1921) maga is matematikus volt. Leánya olyan korban született, melyben a nők nemigen jutottak el az egyetemre, még kevésbé váltak matematikussá. A német egyetemeken a nők ebben az időben csak a professzorok engedélyével látogathatták az előadásokat, s volt olyan professzor, aki mikor ezt a korlátozást feloldották, addig nem kezdett hozzá az előadásához, míg a teremben nő tartózkodott. Erlangenben 1900—1901-es tanévben csupán két nő hallgató volt, közülük az egyik Emmy Noether, aki ekkorára megszerezte a francia és angol nyelvtanári képesítést. 1907. december 17-én avatják a bölcsélet doktorává Erlangenben. Göttingában habilitált, ott lesz professzor. 1928—29-ben vendégprofesszor Moszkvában, majd Frankfurtban. 1933-ban az USA-ba megy. 43 tudományos értekezés maradt utána, 13 doktori disszertáció született meg vezetésével.

A 72 oldalas kis munka Auguste Dick bécsi professzor részletes életrajzi beszámolóján kívül B. L. van der Waerden lipcsei, Hermann Weyl princetoni (N. J.) professzor megemlékezését tartalmazza.

*(T. Gy.)*



*L. Eisenbud, G. T. Garvey és E. P. Wigner: AZ ATOMMAG SZERKEZETE*

Akadémiai Kiadó, 1970.

A könyv megjelentetése igen aktuális volt, hiszen Györgyi Géza 59-ben megírt magfizika könyve óta nem jelent meg Magyarországon összefoglaló magfizikai mű. Wignerék könyvének jellegzetessége, hogy nem a téma szakértői számára íródott, hanem olyan, egy bizonyos fizikai műveltséggel már rendelkező természettudományos érdeklődésű emberek, esetleg tanárok, illetve diákok számára, akiket érdekel, milyen az atommag szerkezete.

Wigner a könyv előszavában hangsúlyozza, hogy a magfizika az elmúlt évtizedben olyan sokat fejlődött, hogy összes eredményét aligha lehet egy aránylag rövid kötetben ismertetni. A szerzők arra törekedtek, hogy a legfontosabb magfizikai ismereteket röviden áttekintsék és az atommag, illetve a mag alkotórészei közt ható erők lényeges sajátosságait ismertessék az olvasóval anélkül, hogy a magfizikai számítások során alkalmazott bonyolult matematikai apparátust bárhol is használnák. A szerzőknek ez a nehéz feladat azért sikerül jól, mert mindhárman kiváló magfizikusok és Wigner a magfizikai kutatások egyik legnagyobb szakértője.

Wignerék könyvének célja az atommag szerkezetére vonatkozó ismereteink összefoglalása. A magfizikát ezen szempont szerint tekintik át. Az alapállapotú magok, illetve a magreakciók tanulmányozása során egyaránt a lényeges szempontjuk: mit tudunk meg a jelenségből az atommag szerkezetére vonatkozóan. Aki a magfizikai irodalom más érthetetlen dzsungelét ismeri, csak elismeréssel csodálhatja az elegánsan, szinte játékosan megírt kis könyvet, és önkéntelenül felteszi önmagának a kérdést: hogyan lehetséges, hogy 120 oldal elolvasása után többet tudott meg az atommag lényegéről, mint három más vaskos könyvből?

Wignerék könyvének elolvasása után joggal merül fel egy másik kérdés: nem lenne célszerű lefordítani a szerzőnek a csoportelméletéről írt, immár a téma legnagyobb klasszikus művének tekintett könyvét magyarra?

A könyv élvezetes olvasását nagymértékben elősegíti Györgyi Géza kitűnő fordítása.

(N. J.)

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária

A kézirat beérkezett: 1970. VII. 14. — Terjedelem: 7 (A/5) ív

70-3602 — Szegedi Nyomda

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
Budapest I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:  
43-790-057-181 útján eszközölhetők.)



Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26,491

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Hoffmann György, Bauer Ferenc és Farkas László: Izotróp anyagok mágneses permeabilitása</i> oldal és optikai állandói közötti összefüggésről. ....	505
<i>Sólyom Jenő: Mágneses szerkezetek és fázisátalakulások vizsgálata a másodrendű fázisátalakulások Landau-elmélete alapján</i> .....	523

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>Neumann János és Wigner Jenő: A színeképek néhány tulajdonságának értelmezéséről a pörgő elektron kvantummechanikája alapján</i> .....	567
---	-----

## KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>Becker—Sauter: Theorie der Elektrizität. (T. Gy.)</i> .....	566
<i>Kovács István: Rotational Structure in the Spectra of Diatomic Molecules. (Varsányi György)</i> .....	583
<i>Auguste Dick: Emmy Noether. (T. Gy.)</i> .....	583
<i>L. Eisenbud, G. T. Garvey és E. P. Wigner: Az atommag szerkezete. (N. J.)</i> .....	584



## A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XVIII. KÖTETÉNEK TARTALOMJEGYZÉKE

<i>Kovács István</i> : Diszlokációk kontinuum elmélete IV .....	1
<i>Berényi Dénes</i> : Vizsgálatok radioaktív bomlásfolyamatok törvényszerűségeinek tisztázására .....	23
<i>Abonyi Iván és Elek Gábor</i> : Megjegyzés egy mikrofizikai modell biológiai alkalmazásához ...	97
<i>Fényes Tibor</i> : Az izokrón ciklotronok és alkalmazásaik .....	109
<i>Matolcsi Tamás és Nagy Tibor</i> : A kemény pion módszer alkalmazása barion-mezon négy pont függvényekre .....	151
<i>Balla János</i> : Nitrogénkriosztát neutronspektroszkópiai mérésekhez 80—300 °K hőmérséklet-tartományra .....	163
<i>Balázs Erzsébet és Kisdi Dávid</i> : Nukleonok effektív kölcsönhatása végtelen maganyagban ...	197
<i>M. J. Moravcsik</i> : Két szabad nukleon kölcsönhatása .....	229
<i>Vasvári Béla</i> : A kalcium, stroncium és bárium elektronszerkezete I. ....	249
<i>Schulze Dietrich</i> : Az abszorpció hatása rácshibák transzmissziós elektronmikroszkópos képin- tenztizására .....	289
<i>Vasvári Béla</i> : A kalcium, stroncium és bárium fémek elektronszerkezete II. ....	305
<i>Vasvári Béla</i> : A kalcium, stroncium és bárium fémek elektronszerkezete III. ....	397
<i>Coulson C. A.</i> : Nem-valencia-kölcsönhatások .....	423
<i>Hoffmann György, Bauer Ferenc és Farkas László</i> : Izotróp anyagok mágneses permeabilitása és optikai állandói közötti összefüggésről .....	505
<i>Sólyom Jenő</i> : Mágneses szerkezetek és fázisátalakulások vizsgálata a másodrendű fázisátalakulá- sok Landau-elmélete alapján .....	523

### A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Heisenberg és P. Jordan</i> : A kvantummechanika alkalmazása az anomális Zeeman-effektus problémájára .....	77
<i>W. Pauli</i> : A mágneses elektron kvantummechanikájáról .....	177
<i>H. Weyl</i> : Kvantummechanika és csoportelmélet .....	357
<i>Neumann János</i> : Lineáris transzformációk csoportjainak és ábrázolásainak analitikus tulaj- donságairól .....	463
<i>Neumann János és Wigner Jenő</i> : A színeképek néhány tulajdonságának értelmezéséről a pörgő elektron kvantummechanikája alapján .....	567

### KÖNYV ÉS FOLYÓIRAT ISMERTETÉS

<i>Attix—Roesch</i> : Radiation Dosimetry (B. M.-né) .....	93
<i>Kiefer—Maushart</i> : Strahlenschutzmesstechnik (B. M.-né) .....	93
SZS jelentések (A. A.) .....	93
CLOR jelentések (A. A.) .....	94
Die Werke von Jakob Bernoulli Band I. (T. GY.) .....	196
A Hadron Spektroszkópiái Szimpózium Előadásai (Montvay István) Akadémiai Kiadó, Buda- pest. 1969 .....	393



<i>E. Fenyves, O. Haiman: The physical principles of nuclear radiation measurements. Akadémiai Kiadó, Budapest. 1969. (Gy. S.)</i> .....	393
<i>Thin Solid Films; Thin Films (Barna B. Péter)</i> .....	462
<i>Becker—Sauter: Theorie der Elektrizität (T. Gy.)</i> .....	566
<i>Kovács István: Rotational Structure in the Spectra of Diatomic Molecules. (Varsányi György)</i>	583
<i>Auguste Dick: Emmy Noether. (T. Gy.)</i> .....	583
<i>L. Eisenbud, G. T. Garvey és E. P. Wigner: Az atommag szerkezete. (N. J.)</i> .....	584

#### A IUPAP HÍREI

A XIII. közgyűlésen elfogadott határozatok .....	503
--	-----



## A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XVIII. KÖTETÉNEK NÉVMUTATÓJA

<i>Abonyi Iván és Elek Gábor: Megjegyzés egy mikrofizikai modell biológiai alkalmazásához</i> . . . . .	97
<i>Balázs Erzsébet és Kisdi Dávid: Nukleonok effektív kölcsönhatása végtelen maganyagban</i> . . . . .	197
<i>Balla János: Nitrogén kriosztát neutronspektroszkópiai mérésekhez 80 . . . 300 °K hőmérséklet-tartományra</i> . . . . .	163
<i>Bauer Ferenc lásd Hoffmann</i>	
<i>Berényi Dénes: Vizsgálatok radioaktív bomlásfolyamatok törvényszerűségeinek tisztázására</i>	23
<i>C. A. Coulson: Nem-valencia-kölcsönhatások</i> . . . . .	423
<i>Farkas László lásd Hoffmann</i>	
<i>Fényes Tibor: Az izokrón ciklotronok és alkalmazásai</i> . . . . .	109
<i>Elek Gábor lásd Abonyi</i>	
<i>Heisenberg W. és Jordan P.: A kvantummechanika alkalmazása az anomális Zeeman-effektus problémájára</i> . . . . .	77
<i>Hoffmann György, Bauer Ferenc és Farkas László: Izotrópanyagok mágneses permeabilitása és optikai állandói közötti összefüggésről</i> . . . . .	505
<i>Jordan P. lásd Heisenberg</i>	
<i>Kisdi Dávid lásd Balázs</i>	
<i>Kovács István: Diszlokációk kontinuum elmélete IV.</i> . . . . .	1
<i>Matolcsi Tamás és Nagy Tibor: A kemény pion módszer alkalmazása barion-mezon négy pont függvényekre</i> . . . . .	151
<i>Moravcsik M. J.: Két szabad nukleon kölcsönhatása</i> . . . . .	229
<i>Nagy Tibor lásd Matolcsi</i>	
<i>Neumann János: Lineáris transzformációk csoportjainak és ábrázolásainak analitikus tulajdonságairól</i> . . . . .	463
<i>Neumann János és Wigner Jenő: A szinképek néhány tulajdonságának értelmezéséről a pörgő elektron kvantummechanikája alapján</i> . . . . .	567
<i>Pauli W.: A mágneses elektron kvantummechanikájáról</i> . . . . .	177
<i>Schulze Dietrich: Az abszorpció hatása rácshibák transzmissziós elektronmikroszkópos képintenzitására</i> . . . . .	289
<i>Sólyom Jenő: Mágneses szerkezetek és fázisátalakulások vizsgálata a másodrendű fázisátalakulások Landau-elmélete alapján</i> . . . . .	523
<i>Vasvári Béla: A kalcium, stroncium és bárium fémek elektronszerkezete I.</i> . . . . .	249
<i>Vasvári Béla: A kalcium, stroncium és bárium fémek elektronszerkezete II.</i> . . . . .	305
<i>Vasvári Béla: A kalcium, stroncium és bárium fémek elektronszerkezete III.</i> . . . . .	397
<i>Wigner Jenő lásd Neumann</i>	



